

# **Die Beschreibung der Entwicklung von deuteriertem Wasser mithilfe eines Multi-Zustandsmodells des Solaren Nebels**

Von der Fakultät für Elektrotechnik, Informationstechnik, Physik  
der Technischen Universität Carolo-Wilhelmina  
zu Braunschweig  
zur Erlangung des Grades eines  
Doktors der Naturwissenschaften (Dr.rer.nat.)

genehmigte Dissertation

von Philipp Maximilian Gast  
aus Berlin

1. Referent (Mentor): Prof. Dr. Motschmann
2. Referent: Prof. Dr. Blum
3. Referent: Prof. Dr. Glaßmeier

Eingereicht am: 08.05.2015

Mündliche Prüfung (Disputation) am: 04.11.2015

Braunschweig, Dezember 2015



# Abstrakt

Die Entstehung von Leben ist eng mit dem Vorhandensein von Wasser und präbiotischen Molekülen verknüpft. Da solche Verbindungen schon in den frühesten Phasen der Sternentstehung nachgewiesen wurden, stellt sich sofort die Frage nach der Historie dieses Vorkommens und deren Verfügbarkeit während der Entstehung der terrestrischen Planeten. Wird von der Solaren Nebel Hypothese ausgegangen, bilden sich Planetensysteme aus den Protoplanetaren Scheiben, die beim Kollaps von metastabilen, hydrostatischen Wolkenkernen entstehen können. Da insbesondere der relative Anteil von deuteriertem Wasser Hinweise auf die Historie des Wassertransports geben kann, wird dessen Verteilung im Rahmen der vorliegenden Arbeit über die zeitliche Entwicklung der Phasen des Solaren Nebels untersucht, und die Ergebnisse anschließend mit Messungen an Kometen und Sternentstehungsregionen verglichen. Die einzelnen Modelle basieren auf einem Kernmodell mit Bonnor-Ebert Profil, einem semi-analytischen, adiabatischen Kollapsmodell und einem Modell für die optisch dichte T-Tauri Scheibenphase. Dabei liegt der Fokus auf der Integration der einzelnen Modelle hin zu einem Ab-initio-Modell, in dem jede Phase von der vorherigen initialisiert wird. Es zeigt sich, dass die Entstehung von Wasser während der Wolkenphase nur sehr wenig von externen Parametern wie Strahlung und Staubbewegung in der Einhüllenden beeinflusst wird, und es relativ gleichmäßig in Form von eisummanteltem Staub über den Wolkenkern verteilt ist. Die Deuterierung des Wassers ist zu dieser Zeit in den inneren Regionen des Kerns höher und weist ein  $D/H$  Verhältnis von maximal 2,2% auf. Am Ende des Kollaps bildet sich innerhalb von ca. 1,4 AU eine sog. "Hot Corino" Zone aus, in der die Evaporation des Wassereises vom Staubbmantel einsetzt. Aufgrund des rein adiabatischen Ansatzes für den Kollaps liegt zu Beginn der Scheibenphase ein sehr geringer Temperaturgradient vor, wodurch es zu Abweichungen von der erwarteten MMSN Scheibenstruktur kommt. Die einsetzenden Neutral-Neutral Reaktionen können das  $D/H$  Verhältnis daher noch nicht signifikant reduzieren, sodass am Ende des Kollaps im Bereich der sich bildenden Scheibe ein konstantes  $D/H$  Verhältnis von 2,5% vorliegt. Die kontinuierliche Initialisierung der chemischen Konzentrationen führt beim Übergang zur Scheibe zu starken Einschwingvorgängen und erfordert zukünftig die Einbindung eines zwischengeschalteten Modells für den Aufbau der vertikalen Struktur.





# Abstract

Many definitions of habitability rest on the availability of liquid water, but it is still an open question where planetary water actually comes from. Recently it has been confirmed that it already exists within grand molecular clouds, which are nurseries for stellar formations, along with certain prebiotic molecules. Within the Solar Nebula hypothesis the metastable hydrostatic cores of these clouds collapse while building up a disk around their equatorial plane of rotation to redistribute their angular momentum. Based on this temporal evolution this work seeks to model the transport and chemical evolution of the matter accreted by the protostar during the three stages of the Solar Nebula in an ab-initio approach, so that every stage is initialized by the physical and chemical parameters of the former. The individual models are a hydrostatic cloud core, a semianalytic adiabatic collapse and a disk model, including detailed dust convection. The chemistry is treated in a Lagrangian approach by combining the before mentioned models with a gas-grain chemistry model. The main focus is on the distribution of water and its deuterated counterparts since the  $D/H$  ratio can give important clues about the origin and history of cometary and planetary water reservoirs. The results suggest that water is a robust phenomenon within the cloud stage and is relatively insensitive to variations in the external radiation and dust migration in its envelope. The highest fraction of deuterated water is located in the deeply embedded core region with a  $D/H$  value of at most 2,2%. Meanwhile, the overall water concentration is found to be almost constant along the radial extent of the core, mainly carried by ice coated grains. Towards the end of the collapse of the cloud core a “hot corino” zone builds up with a diameter of less than 1,4 astronomical units. The beginning neutral-neutral reactions in this zone can not yet change the deuteration significantly, leading to a radially constant value of  $D/H \approx 2,5\%$  in the disk build up region. Due to the adiabatic nature of the collapse, the resulting disk has a very low temperature gradient which also leads to other deviations from the expected MMSN structure. The continuous initialization of the chemical disk composition has been hindered by the absence of a vertical representation in the collapse phase. In the future this can be improved by adding an intermediate thick disk model.



Publikationen:

- **S. Kupper, C. Tornow, and P. Gast:** “*Two Different Sources of Water for the Early Solar Nebula*”,  
Origins of Life and Evolution of the Biosphere, Vol. 42, pp. 81–92, **Juni 2012**
- **C. Tornow, P. Gast, S. Kupper, I. Pelivan, E. Kührt, U. Motschmann:**  
“*Water formation in the early solar nebula: I. The quasi-stationary cloud core*”,  
Planetary and Space Science, Vol. 98, pp. 216–232, **Dezember 2013**
- **C. Tornow, P. Gast, U. Motschmann, E. Kührt, S. Kupper, I. Pelivan:**  
“*Water formation in the early solar nebula: II. The collapsing cloud core*”,  
Planetary and Space Science, Vol. 98, pp. 233–253, **Dezember 2013**
- **C. Tornow, P. Gast, I. Pelivan, E. Kührt, S. Kupper, E. Kührt, U. Motschmann:** “*Water formation mechanisms in early solar nebula and related D/H ratios*”,  
Geochemical Journal, Vol. 48 (No. 6), pp. 527–547, **November 2014**
- **K. Willacy, C. Alexander, M. Ali-Dib, C. Ceccarelli, S. Charnley, M. Doronin, Y. Ellinger, P. Gast, E. Gibb, S. N. Milam, O. Mousis, F. Pauzat, C. Tornow, E. S. Wiström, E. Zicler:** “*Composition of the protosolar disk and the formation conditions for comets*”,  
Space Science Reviews, Vol. 197 (No. 1), pp. 151–190, **Juni 2015**

Wissenschaftliche Vorträge:

- Vortrag: **Stefan Kupper, Carmen Tornow, Philipp M. Gast**: “*Chemical Scenario of the Multi-Phase Solar Nebula*”,  
HGF Allianz Week, Februar 2012
- Vortrag: **Philipp M. Gast**: “*Physical Conditions in the Disk Phase of the Solar Nebula as a Background for its Chemical Evolution*”,  
TU Braunschweig, Oberseminar Theoretische Physik, Mai 2012
- Vortrag: **Philipp M. Gast**: “*Physical conditions in the disk phase of the solar nebula*”,  
Research Seminar HGF Allianz, Mai 2012
- Vortrag: **Philipp M. Gast**: “*Wie kam das Wasser auf die Erde?*”,  
Lange Nacht der Wissenschaften, Juni 2012
- Poster: **P. M. Gast, C. Tornow, S. Kupper, E. Kuhrt, U. Motschmann**:  
“*Influence of Initial Abundances on Chemical Evolution of the Turbulent Disk*”,  
8th Conference on Planet Formation and Evolution (PFaE), September 2012
- Vortrag: **P. M. Gast, C. Tornow, S. Kupper, I. Pelivan, E. Kuehrt, U. Motschmann**: “*Influences on Water Formation in the early Solar Nebula*”,  
HGF Allianz Week, Mai 2013
- Vortrag: **P. M. Gast, C. Tornow, S. Kupper, I. Pelivan, E. Kuehrt, U. Motschmann**: “*Influences on Water Formation in the early Solar Nebula*”,  
TU Braunschweig, Oberseminar Theoretische Physik, Juli 2013
- Vortrag: **Philipp M. Gast**: “*Warum wir aus Sternenstaub sind...*”,  
Lange Nacht der Wissenschaften, August 2013
- Vortrag: **P. M. Gast, C. Tornow, S. Kupper, I. Pelivan, E. Kuehrt, U. Motschmann**: “*Evolution of the Chemical Composition in the Solar Nebula and its Influence on the Distribution of Water*”,  
European Planetary Science Congress (EPSC), September 2013
- Vortrag: **P. M. Gast, C. Tornow, E. Kuehrt, U. Motschmann**: “*Influence of the disk stage on the chemical composition of cometesimals*”,  
International Cometary Workshop (ICW) - Comets as Tracers of Solar System Formation and Evolution, April 2014

# Inhaltsverzeichnis

<b>Nomenklatur</b>	<b>i</b>
<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1. Die Bausteine des Lebens - Von der Urmaterie zu Molekülwolken . . . .	2
1.2. Von diffusen Wolken zu Planetensystemen: Die Solar Nebula Hypothese .	4
1.2.1. Wolkenkern . . . . .	10
1.2.2. Kollabierender Wolkenkern . . . . .	10
1.2.3. Protosolare Scheibe . . . . .	11
1.3. Dynamische Entwicklung des Sonnensystems . . . . .	13
1.4. Habitabilität und Leben . . . . .	14
1.4.1. Die Verteilung von Deuterium im Sonnensystem . . . . .	19
1.5. Stand der Forschung zur numerischen Modellierung . . . . .	20
1.5.1. Modellierung der Wolke . . . . .	21
1.5.2. Modellierung des Kollaps . . . . .	22
1.5.3. Modellierung der Scheibe . . . . .	23
1.5.4. Modellierung der Zusammensetzung der terrestrischen Planeten .	25
1.6. Motivation und Aufbau dieser Studie . . . . .	26
<b>2. Modelle und Theorie</b>	<b>29</b>
2.1. Chemische Prozesse in kosmischen Umgebungen . . . . .	29
2.1.1. Mathematische Modelle zur Beschreibung der chemischen Kinetik	31
2.1.2. Chemie in der Dunkelwolke . . . . .	41
2.1.3. Chemie während des Kollapses . . . . .	42
2.1.4. Chemie in der Scheibenphase . . . . .	42
2.1.5. Eingangsparameter des chemischen Modells . . . . .	45
2.2. Modellierung des Wolkenkerns . . . . .	47
2.2.1. Dichteprofil des Wolkenkerns . . . . .	47
2.2.2. Temperaturgleichgewicht im Wolkenkern . . . . .	48
2.2.3. Kopplung von Dichte- und Temperaturprofil im Wolkenkern . . .	49
2.2.4. Simulationsprozedur während der Wolkenphase . . . . .	51

2.3.	Kollabierender Wolkenkern . . . . .	53
2.3.1.	Semianalytische Beschreibung des Kollaps . . . . .	54
2.3.2.	Lagrange-Behandlung der Chemie während der Kollapsphase . . .	56
2.4.	Scheibenstadium . . . . .	57
2.4.1.	Dichtemodell der Scheibe . . . . .	60
2.4.2.	Geschwindigkeitsfelder in der Scheibe . . . . .	63
2.4.3.	Randbedingungen für die Scheibe . . . . .	64
2.4.4.	Chemie während der Scheibenphase . . . . .	66
<b>3.</b>	<b>Ergebnisse der chemischen Entwicklung im SN</b>	<b>67</b>
3.1.	Chemie des Wolkenkerns . . . . .	67
3.1.1.	Der Einfluss von Strahlung auf die Wasserproduktion im Wolkenkern	69
3.1.2.	Deuterierung des prästellaren Kerns . . . . .	73
3.1.3.	Chemische Verteilung am Ende der Wolkenphase . . . . .	78
3.2.	Chemie in der Kollapsphase . . . . .	78
3.2.1.	Entwicklung der Wasserverteilung in der Kollapsphase . . . . .	80
3.3.	Initialisierung der Scheibenphase . . . . .	84
3.4.	Machbarkeitsstudie zur chemischen Initialisierung der Scheibenphase . . .	90
<b>4.</b>	<b>Diskussion der Ergebnisse</b>	<b>97</b>
4.1.	Bewertung der Ergebnisse der Wolkenphase . . . . .	97
4.2.	Bewertung der Ergebnisse der Kollapsphase . . . . .	98
4.3.	Bewertung der Initialisierung der Scheibenphase . . . . .	99
4.4.	Bewertung der kontinuierlichen Initialisierung und Ausblick . . . . .	100
<b>5.</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>107</b>
	<b>Literatur</b>	<b>109</b>
<b>A.</b>	<b>Appendix A</b>	<b>129</b>
A.1.	Herleitung der Kontinuitätsgleichung in der Finite Volumen Formulierung	129
A.2.	Diskretisierung der Kontinuitätsgleichung . . . . .	130
A.2.1.	Diskretisierung diffusiver Terme . . . . .	132
A.2.2.	Diskretisierung des konvektiven Terms . . . . .	132

# Nomenklatur

## Lateinische Symbole

$a$	[s]	Jahr, das 31557600-fache einer Sekunde
$A_v$	[mag]	Abschirmungsstärke des ISRF
$B$	[Tesla]	Magnetische Flussdichte
$c_s$	[m/s]	Schallgeschwindigkeit
$c_p$	[J/(kg K)]	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck
$c_v$	[J/(kg K)]	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen
$e$	[C]	Elementarladung
$E_a$	[J mol <sup>-1</sup> ]	Aktivierungsenergie
$f$	[-]	Oszillatorstärke
$F$	[N]	Kraft
$F_D$	[N]	Hydrodynamischer Widerstand
$F_g$	[N]	Gravitationskraft
$F_P$	[N]	Druckkraft
$F_Z$	[N]	Zentrifugalkraft
$f(u)$	[-]	Funktion für viskosen Impulsbeitrag
$F_\lambda$	[s <sup>-1</sup> m <sup>-2</sup> ]	energetische Flussdichte
$h$	[J s]	Plancksches Wirkungsquantum
$h_g$	[m]	Skalenhöhe der Scheibe
$I(\lambda)$	[Habing]	Intensität des Strahlungsfeldes 1 Habing $\hat{=}$ 1 <i>erg cm<sup>-2</sup> s<sup>-1</sup> sr<sup>-1</sup></i>
$k$	[s <sup>-1</sup> cm <sup>-3</sup> ]	Ratenkoeffizient bei chem. Reaktionen
$k_B$	[J/K]	Boltzmann-Konstante
$m$	[kg]	Masse
$\dot{M}$	[kg/s]	Massenakkretionsrate
$n$	[cm <sup>-1</sup> ]	Teilchenzahldichte
$N$	[-]	Teilchenzahl
$P$	[Pa]	Druck
$R_C$	[AU]	äußere Grenze des Kollaps

$R_D$	[AU]	äußere Grenze der Scheibe
$R_{env}$	[AU]	äußere Grenze der Einhüllenden
$R_W$	[AU]	äußere Grenze des Wolkenkerns
$S$	[-]	“Sticking”-Koeffizient
$s$	[cm]	effektiver Radius eines Staubkorns
$S_C$	[-]	Schmidtzahl
$t$	[s]	Zeit
$t_f$	[s]	Reibungszeit um Staub- und Gasdynamik zu koppeln
$T_s$	[-]	“Stopping Time”
$u, v$	[m/s]	Geschwindigkeit
$v_{+/-}$	[s <sup>-1</sup> cm <sup>-3</sup> ]	Reaktionsrate chem. Reaktionen
$v_{th}$	[m/s]	thermische Geschwindigkeit
$W_{r,\phi}$	[Pa]	lokaler Spannungstensor
$X$	[kg/m <sup>3</sup> ]	chemische Konzentration
$z_s$	[m]	Höhe über der Mittelebene der Scheibe, bei der die Atmosphäre beginnt

## Griechische Symbole

$\alpha$	[C m <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> ]	Polarisierbarkeit
$\beta$	[-]	Widerstandsbeiwert eines Staubkorns
$\Delta$	[-]	Laplace Operator
$\nabla$	[-]	Nabla Operator
$\eta$	[Ω]	elektrischer Widerstand
$\iota$	[-]	Polytropenexponent
$\kappa$	[cm <sup>2</sup> g <sup>-1</sup> ]	Opazität
$\kappa$	[cm <sup>-1</sup> ]	Absorptionskoeffizient
$\lambda$	[nm]	Wellenlänge der Strahlung
$\mu$	[kg]	reduzierte Masse der Reaktanten bei chem. Reaktionen
$\mu_B$	[H m <sup>-1</sup> ]	magnetische Permeabilität
$\mu_p$	[-]	auf Wasserstoff normierter, gewichteter Mittelwert der vorhandenen Moleküle
$\nu$	[m <sup>2</sup> /s]	kinematische Viskosität
$\nu$	[1/s]	Strahlungsfrequenz
$\rho$	[kg/m <sup>3</sup> ]	Dichte
$\rho_p$	[m <sup>-3</sup> ]	Teilchendichte eines Staubkorns



$\sigma$	[cm <sup>2</sup> ]	mittlere Stauboberfläche
$\Sigma$	[g/cm <sup>2</sup> ]	Zeilendichte der Scheibe
$\tau_{ij,t}$	[kg/(m s <sup>2</sup> )]	Reynolds-Spannungs-Tensor
$\tau$	[-]	optische Tiefe (nichtdimensionale Abschirmung der UV Strahlung)
$\tau_{chem}$	[s]	chemische Anpassungszeitskala
$\tau_{eq}$	[s]	Gleichgewichtsskala
$\tau_{lifetime}$	[s]	Lebensdauer eines Zustands
$\phi$	[-]	Gravitationspotential
$\chi$	[cm <sup>2</sup> ]	Wirkungsquerschnitt
$\omega$	[1/s]	Parameter
$\Omega_K$	[1/s]	Keplersche Rotationsfrequenz
$\zeta$	[1/s]	Strahlungsrate

## Indizes

*	Vorhandensein signifikanter innerer Energie
0	Größe bei 1 AU
<i>ad</i>	Adsorption
<i>ass</i>	Assoziation
<i>C</i>	Größe in der Kollapsphase (Collapse)
<i>CRP</i>	Größe kosmischer Strahlung (Cosmic Ray Particle)
<i>d</i>	Größe in der Staubphase (dust)
<i>D</i>	Größe in der Scheibenphase (Disk)
<i>diss</i>	Dissoziation
<i>env</i>	Größe bezogen auf die Einhüllende der Wolke
<i>g</i>	Größe in der Gasphase
<i>i</i>	Spezies
<i>RA</i>	Radiative Assoziation
<i>RN</i>	Radionukleide
<i>rad</i>	Emission (radiation)
<i>W</i>	Größe in der Wolkenphase

## Abkürzungen

AGN	Aktive Zentren von Galaxien (Active Galactic Nuclei)
ALCHEMIC	Astrochemie Code von Semenov & Wiebe (2011)
ALMA	Radioteleskop in der Atacama Wüste (Atacama Large Millimeter/Submillimeter Array)
AT	Atmosphäre der Scheibe
AU	Astronomische Einheit, Entfernung zwischen Erde und Sonne
BB	Urknall (Big Bang)
BBN	Nukleosynthese nach dem Urknall (Big Bang Nucleosynthesis)
BES	Bonnor-Ebert-Sphäre
CAI	Calcium- und Aluminiumreiche Einschlüsse (Ca-Al-rich Inclusions)
CRP	Kosmische Partikelstrahlung (Cosmic Ray Particles)
CTTS	Klassischer T-Tauri Stern (Classical T-Tauri Star)
DGL	Differentialgleichung
DVODEPK	Softwarepaket zur Lösung von Gleichungssystemen
FUV	Fernes Ultraviolett (Far UV)
GMC	Molekulare Wolke (Giant Molecular Cloud)
HTCs	Kometen der Halley Familie (Halley Type Comets)
ISM	Interstellares Medium (Interstellar Medium)
ISRF	Interstellares Strahlungsfeld (Interstellar Radiation Field)
IZ	Innere Zone der Scheibe
JED	Jet emittierende Scheibe (Jet Emitting Disk)
JFC	Komet der Jupiter Familie (Jupiter Family Comet)
L134N	Kalte, sternlose Wolke
LHB	Großes Bombardement (Late Heavy Bombardment)
LPCs	Langperiodische Kometen (Long Period Comets)
LVAP	Späte Akkretionsphase (Late Veneer Accretion Period)
ME	Mittelebene der Scheibe
MHD	Magnetohydrodynamik (Magneto Hydro Dynamics)
MINPACK	Robuste Routine für Minimierungsprobleme
ML	Molekulare Lage der Scheibe
MMR	Mittlere Resonanz der Umlaufzeiten

---

	(Mean Motion Resonanz)
MMSN	Minimale Masse des Solaren Nebels, die erforderlich ist um unsere Planeten auszubilden
	(Minimum Mass Solar Nebula)
MOL	Linienmethode (Method Of Lines)
MPFIT	Routine zur Bestimmung einer Ausgleichsfunktion nach der Methode der kleinsten Quadrate
MRI	Magnetorotationsinstabilität
	(Magneto Rotation Instability)
MRN	Staubverteilung nach Mathis et al. (1977)
OCC	Komet der Oortschen Wolke (Oort Cloud Comet)
OSU	Astrochemie Datenbank
pc	Parsec; $1\text{ pc} \approx 3,26$ Lichtjahre
PAH	Polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe
	(Polycyclic Aromatic Hydrocarbons)
PDR	Photodominierte Zone in diffusen Wolken
	(Photo Dominated Region)
PISA	Datenbank für Modelle von PMS Sternen
PMS	Stern, bevor er in die Hauptreihe eintritt
	(Pre-Main Sequence Star)
PPSN	Mögliche Vorläufer Solarer Nebel
	(Possible Precursor of the Solar Nebula)
QSCC	Quasistationäre Wolkenkerne
	(Quasi-Stationary (starless) Cloud Cores)
SED	Spektrale Energieverteilung
	(Spectral Energy Distribution)
SN	Solarer Nebel
SIS	Singuläre Isothermale Sphäre des Wolkenkerns
TCS	Kondensationssequenz
	(Thermodynamical Condensation Sequence)
TMC-1	Molekulare Wolke in der Taurus Region
	(Taurus Molecular Cloud 1)
TW Hya	Sonnennächster, klassischer T-Tauri Stern
UMIST	Astrochemie Datenbank
UV	Ultraviolette Strahlung
WTTS	Schwache Linien T-Tauri Stern (Weak Line T-Tauri Star)
YSO	Junges sonnenähnliches Objekt (Young Stellar Object)

## Astronomische Symbole

Es werden außerdem zum Teil die astronomischen Symbole der Körper im Sonnensystem als Indizes benutzt.



Sonne



Erde



Jupiter



Saturn

# 1. Einleitung

Die Frage nach der Entstehung des Lebens und der Möglichkeit zu außerirdischem Leben ist tief im Bewusstsein der Menschheit verwurzelt. Um diese Frage wissenschaftlich beantworten zu können, ist es nötig den Bausteinen des Lebens zu ihren Ursprüngen zu folgen, um so Hinweise auf notwendige Bedingungen für die Entstehung des Lebens zu finden. Neben Wasser können auch einige primitive Vorläufer biologisch wichtiger Moleküle, die sogenannten Präbiotischen Moleküle (PM), schon in Molekularen Wolken (GMC) nachgewiesen werden. Die hydrostatischen Kerne dieser Wolken bilden im Rahmen der Solaren Nebel (SN) Hypothese die frühesten zusammenhängenden Vorläufer von Sternensystemen. Nach dieser Theorie können die metastabilen Kerne dieser Wolken kollabieren und sich über das Zwischenstadium der Protoplanetaren Scheibe (PD) zu Planetensystemen entwickeln.

Im Rahmen dieser Arbeit sollen Entstehung und Transport chemischer Verbindungen über die drei Phasen des Solaren Nebels verfolgt werden. Besonderer Fokus liegt dabei auf der Verteilung des Wassers, da es neben seiner Wichtigkeit für biologische Prozesse auch für geologische Fragestellungen von entscheidender Bedeutung ist. Insbesondere der relative Anteil von deuteriertem Wasser gibt Aufschluss über die Historie des Wassertransports zu den terrestrischen Planeten. Aus diesem Grund wird dessen räumliche und zeitliche Verteilung untersucht, um Einsichten über Ort und Zeit der Entstehung verschiedener Wasserreservoirs innerhalb des Sonnensystems zu gewinnen.

Im folgenden Kapitel wird das Thema der Arbeit zunächst phänomenologisch dargestellt, sowie seine Einbettung in verwandte Themenbereiche aufgezeigt. Abschließend wird der Stand der Forschung diskutiert und gezeigt, warum die vorliegende Studie einen Beitrag zur Weiterentwicklung des aktuellen Wissensstandes in Bezug auf die Entstehung und den Transport von Wasser im Solaren Nebel liefern kann.

## 1.1. Die Bausteine des Lebens - Von der Urmaterie zu Molekülwolken

Nach unserem aktuellen Verständnis von den ersten Sekunden des Universums (Big Bang Nucleosynthesis (BBN)) konnten sich kurz nach dem Urknall vor ca. 13,7 Milliarden Jahren (Hinshaw et al., 2009) zuerst nur die Elemente  $H$ ,  $He$ ,  $Li$  bilden (siehe Tabelle 1.1). Schwerere Elemente konnten aufgrund der schnellen Ausdehnung des Universums und der damit verbundenen Abkühlung zunächst nicht entstehen.

$H$	$D$	${}^4He$	${}^3He$	${}^7Li$
1	$2,53(\pm 0,04) \times 10^{-5}$	$0,249(\pm 0,009)$	$\sim 1(\pm 2) \times 10^{-5}$	$1,6(\pm 0,3) \times 10^{-10}$

**Tabelle 1.1.:** Relative Verteilung der chemischen Elemente nach dem Urknall relativ zu atomarem Wasserstoff (Beringer et al., 2012).

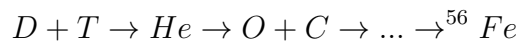
Wegen seiner Wichtigkeit für die spätere Diskussion sei insbesondere darauf hingewiesen, dass beinahe das komplette heute noch existierende Deuterium aus der Zeit des Urknalls stammt. Bis heute sind keine Prozesse bekannt, welche in der Lage gewesen wären Deuterium in der Folgezeit effizient zu produzieren (Epstein et al., 1976; Galli et al., 1995). Seitdem nimmt sein kumulativer Anteil durch die Fusion zu Helium innerhalb von Sternen immer weiter ab und ist heute bereits auf einen Wert von  $1,5 \times 10^{-5}$  relativ zu atomarem Wasserstoff  $H$  abgefallen (Linsky, 2003).

Die beim Urknall entstandene Urmaterie wurde im Laufe der Zeit von mehreren Populationen von Sternen prozessiert und mit schwereren Elementen angereichert. Man unterscheidet zwischen drei Populationen von Sternen:

- Population I – Sonnenähnliche, junge Sterne mit hoher Metallizität (hoher Anteil schwerer Elemente)
- Population II – Alte Sterne mit geringer Metallizität
- Population III – Erste Sternpopulation ohne schwere Elemente (noch nicht beobachtet)

Die zeitlich erste Sternpopulation (Pop. III) soll dabei weit massiver gewesen sein als heutige Sterne, da sich in dem abkühlenden Universum anfangs noch größere Massenkongfigurationen hydrostatisch stabilisieren konnten. Auch verfügten diese Sterne durch die fehlenden schweren Elemente nicht über einen so effizienten Kühlungsmechanismus

wie spätere Populationen (Bromm et al., 2002). Schwere Elemente entstehen, wenn ein Stern seinen Wasserstoffanteil verbrannt hat und durch den dann fehlenden thermischen Druck weiter kollabiert. So ist der sogenannte “Drei  $\alpha$  Prozess”: ( $3^4\text{He} \rightarrow ^{12}\text{C}$ ) in der Hülle von Sternen die grundlegende Quelle für die Entstehung von Kohlenstoff. Insgesamt nimmt die Menge an Materie mit größerer Nukleonenzahl durchschnittlich zu. Dieser Vorgang wird als Nukleosynthese bezeichnet und beschreibt die Fusion von Atomen mit niedriger zu hoher Ordnungszahl innerhalb schwerer Sterne. Eine Fusionsfolge, die bei Eisen endet ist beispielhaft im Folgenden aufgeführt:



Eisen mit der höchsten Bindungsenergie pro Nukleon ist dabei Endprodukt von “Brennprozessen” innerhalb massereicher Sterne. Noch schwerere Elemente werden erst in den Schockfronten von Supernovae<sup>1</sup> gebildet, da durch ihre Fusion keine Energie gewonnen werden kann.

Die mit schwereren Elementen angereicherte Materie wird nach Ende der Lebenszeit der Sterne teilweise wieder an das ISM (Interstellare Medium) abgegeben. Bestimmte Elemente sind dabei aufgrund ihrer Stabilität häufiger als andere: Elemente mit geradzahligem Nukleonen bzw. “magischen Zahlen” (2,8,20,...). Neben den molekular und atomar vorliegenden Elementen besteht das ISM zu ca 1% aus chemisch differenziertem Staub von ungefähr 100 nm Größe (Wurm & Schnaiter, 2002). Mit “Staub” werden im Folgenden Aggregate, d.h. größere Verbände von Molekülen unterschiedlicher Größe aus vornehmlich schwereren Elementen, bezeichnet, die selbst zwar kaum noch chemisch umgewandelt werden, als Katalysator, Kondensationskeim und Träger von kondensierten Spezies aber noch eine sehr wichtige Rolle spielen. Der Staub wird in kalten, dichten und turbulenten Regionen wie Sternatmosphären oder kollabierenden Wolkenkernen gebildet (Dirks et al., 2008) und besteht hauptsächlich aus Olivin, Pyroxenen, Silikat und PAHs (polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe) (Draine, 2003).

Sterne unterschiedlicher Populationen unterscheiden sich also anhand ihrer Zusammensetzung, d.h. dem Gehalt an schweren Elementen. Die Nomenklatur ist dabei historisch bedingt und folgt der Reihenfolge der Entdeckung. Da unsere Sonne eine hohe Metallizität aufweist, d.h. einen hohen Anteil an Elementen schwerer als Helium besitzt, wird sie zu der jüngsten und häufigsten Sternpopulation gezählt. Innerhalb unseres Sonnensystems finden außer im Sonnenkern keine quantitativ bedeutenden nukleosynthetischen Umwandlungen statt. Daher muss die relative Häufigkeit aller Elemente schon vor Entstehung unseres Sonnensystems angelegt worden sein. Die Beobachtung von Gebieten innerhalb unserer Galaxis, in denen noch heute Sternentstehung stattfindet, zeigt uns,

---

<sup>1</sup>durch Neutronen Absorption (s und r Prozesse)

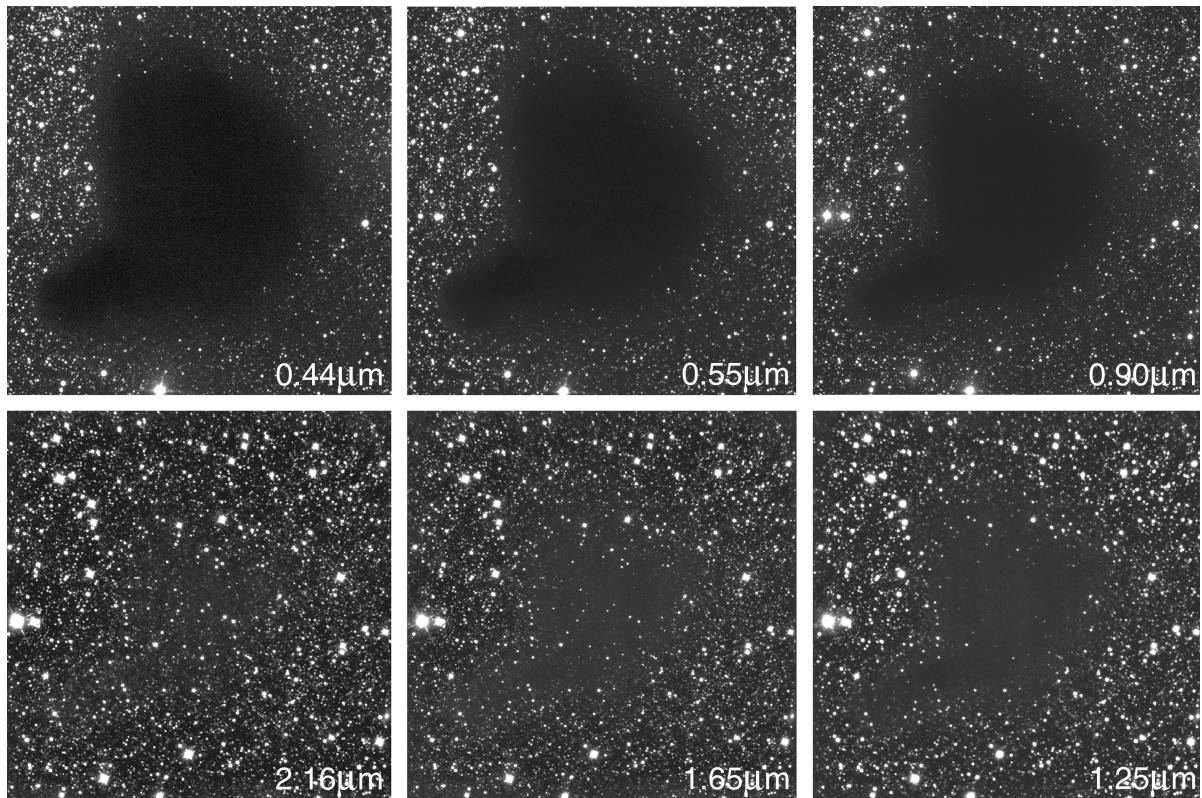
dass sich diese in sehr inhomogenen diffusen Wolken interstellarer Materie ereignet, die kaum eine räumliche Separation von verschiedenen Elementen aufweisen. Unser Sonnensystem lässt jedoch in den Planeten und kleineren Körpern eine relativ eindeutige Entmischung erkennen mit leichten, volatilen Elementen in den äußeren Bereichen und schwereren, refraktiven Elementen in den inneren Bereichen. Dass diese Trennung jedoch nicht so strikt ist, wie eine einfache Betrachtung vermuten lässt, ist letztlich die Tatsache, die unseren Planeten bewohnbar macht. Im Gegensatz zu den Planeten ähnelt die Sonne in ihrer Zusammensetzung sehr viel mehr den diffusen Wolken des ISM. Um die Frage nach der Entstehung des Lebens und der Habitabilität von extrasolaren Planeten beantworten zu können, ist es entscheidend den Prozess zu verstehen, der von einer relativ gleichverteilten Mischung von Elementen zur „Entmischung“ der Elemente, und somit zu den unterschiedlichen Planetenbeschaffenheiten in Sonnensystemen führt. Das etablierte Modell, welches diesen Prozess beschreibt, ist die Solar Nebula Hypothese. Sie wird im Folgenden kurz vorgestellt.

## **1.2. Von diffusen Wolken zu Planetensystemen: Die Solar Nebula Hypothese**

Vor dem Entstehen von Planetensystemen sammelt sich insterstellare Materie in diffusen Wolkenstrukturen an, die häufig durch den Strahlungsdruck in der Nähe befindlicher Sterne zusammengetrieben werden. Deren Natur ist dabei überaus divers und ihre Strukturen bilden einige der eindruckvollsten Ansichten im Universum. Es existieren sowohl relativ isolierte Sternentstehungsregionen, in denen sich Dunkelwolken ähnlich der in Abbildung 1.1 gezeigten bilden können, als auch Regionen, in denen die Sternentstehungsrate höher und der Bereich stärker lokalisiert ist. Diese Bereiche werden auch „Cluster“ genannt. Ein Beispiel für eine Region der isolierten Sternentstehung ist die Taurus Region (Hartmann, 2002), in der die jungen Sterne (YSOs) relativ schwach durch Wechselwirkung untereinander oder mit der ISM beeinflusst werden und sich meist masseärmere Sterne, ähnlich unserer Sonne bilden (Rowles & Froebrich, 2011). Ein prominentes Beispiel für eine durch Strahlungs- und Materieaustausch wechselwirkungsintensive Region ist der Orionnebel (siehe Abbildung 1.2 mit den vergrößerten Einsätzen verschiedener YSOs).

Die verschiedenen Sternentstehungsregionen in unserer Galaxie unterscheiden sich auch hinsichtlich ihrer elementaren Kompositionen der Spurenelemente  $O, C, N, \dots$  stark voneinander. Die Hauptparameter sind dabei der Abstand zum Mittelpunkt der Galaxie





**Abb. 1.1.:** Dunkelwolke Barnard 68 (B68) in ca. 160 pc Entfernung. Die Wolke ist über ihre Verdunkelung der im Hintergrund befindlichen Sterne zu sehen. Die Wirkung der Verdunkelung nimmt zu größeren Wellenlängen hin jedoch ab, bis die Wolke im fernen Infrarot transparent erscheint. B68 befindet sich im hydrostatischen Gleichgewicht (Alves et al., 2001; Lada et al., 2003) und in großer Übereinstimmung mit dem Modell der Bonnor-Ebert-Sphäre (BES) (siehe Abschnitt 2.2)

Quelle: ESO

und die Sternentstehungsdichte in möglichen Spiralarmen (Henry & Worthey, 1999). Allgemein lässt sich sagen, dass dichtere Regionen eine höhere Sternentstehungsrate aufweisen und dort vermehrt schwere Sterne mit kürzerer Lebenszeit gebildet werden. Wegen des in Abschnitt 1.1 beschriebenen Mechanismus der Anreicherung des umliegenden Gebietes mit prozessierter Materie, ist auch der Anteil der Metallizität in diesen Regionen höher. Vor diesem Hintergrund stellt selbst die Identifizierung der vermutlichen elementaren Anfangsverteilung der Materie, sowie des vorherrschenden Strahlungsfeldes (Montmerle et al., 2006) des potentiellen Vorläufers unseres Sonnensystems (PPSN) ein nicht-triviales Problem dar (Kupper, 2014).

Seit der Entdeckung von kalten Strahlern der Klasse 0 (siehe Abb. 1.3) (Andre et al., 1993) und ihrer Identifizierung mit potentiellen Vorläufern Solarer Nebel, wurde



**Abb. 1.2.:** Orionnebel mit lokalen Vergrößerungen in Entstehungsbereichen von YSOs. Der Orionnebel gilt als Paradebeispiel für eine sehr aktive, dichte Sternentstehungsregion, in der sich die bildenden YSOs durch gegenseitige Wechselwirkung stark beeinflussen.  
Quelle: NASA, ESA, M. Robberto, the Hubble Space Telescope Orion Treasury Project Team and L. Ricci (ESO)

versucht die Entstehungsregion unserer Sonne auf eine der zwei möglichen Entstehungsarten (im Cluster oder isoliert) zurückzuführen. Für eine Bildung im Cluster sprechen dabei relativ häufig im Sonnensystem vorkommende kurzlebige radioaktive Isotope wie z.B.  $^{26}\text{Al}$  (Dauphas & Chaussidon, 2011) und die dynamischen Eigenschaften einiger transneptunischer Objekte (Schwamb et al., 2010). Da eine zu intensive Interaktion mit anderen Sternen jedoch wohl kaum zu einem so stabilen Planetensystem wie dem Sonnensystem führen würde, müsste sich der PPSN relativ frühzeitig aus diesem Cluster gelöst haben (Pfalzner, 2013).

Die Solar Nebula (SN) Hypothese bezeichnet die momentan akzeptierte Theorie, wie sich aus dem diffusen ISM über die Stadien

- sternloser, metastabiler Kern
- kollabierender Wolkenkern
- Akkretionsscheibe mit Protostern im Zentrum

ein Sternensystem mit Planeten ausbilden kann. Das System SN strebt wie jedes offene physikalische System nach einem Zustand minimaler Energie. Das Kollabieren des Nebels unter Erhaltung des Drehimpulses kann daher als eine Art Motor angesehen werden, bei dem die potentielle Energie des Gases in Wärme und Strahlung umgesetzt wird (Hartmann, 2000). Die sich dabei ausbildenden Akkretionsscheiben mit Massen zwischen  $\sim 0,01 - 0,5 M_{\odot}$  sind ein verbreitetes Phänomen im Universum und kommen auch in anderen Größenklassen, zum Beispiel bei der Planetenentstehung oder den Scheiben um superschwere schwarze Löcher in den Zentren von aktiven Galaxien (AGN), vor <sup>2</sup>.

Vor dem Eintritt in die Hauptreihe (PMS) lassen sich junge stellare Objekte grob anhand ihrer spektralen Energieverteilungen (SEDs) charakterisiert (Lada, 1987). Dabei wird die energetische Flussdichte je Wellenlänge  $F_{\lambda}$  in Beziehung zur Wellenlänge  $\lambda$  gesetzt:

$$F \propto \lambda^{\alpha} \quad \alpha = \frac{d \log(\lambda F_{\lambda})}{d \log(\lambda)}$$

der Exponent  $\alpha$  wird spektraler Index genannt und beschreibt den Abfall der Energiedichte mit zunehmender Wellenlänge ( $\alpha \in [-2 \dots 0]$ ). Diese Klassifikation wird im allgemeinen im Wellenlängenbereich zwischen  $2,2 \mu\text{m}$  und  $20 \mu\text{m}$  angewendet. Je stärker dieser Abfall ist, desto älter ist im Allgemeinen der beobachtete Protostern. Dies erklärt sich aus der den PMS Stern umgebenden Staubhülle, welche hochenergetische Photonen absorbiert und die aufgenommene Energie über langwelligere Strahlung wieder abgibt. In späteren Phasen des SN ist diese Hülle durch Akkretion, Koagulation und

---

<sup>2</sup>Für einen Überblick über die verschiedenen Größenklassen und ihrer Unterschiede siehe Abramowicz et al. (2006).

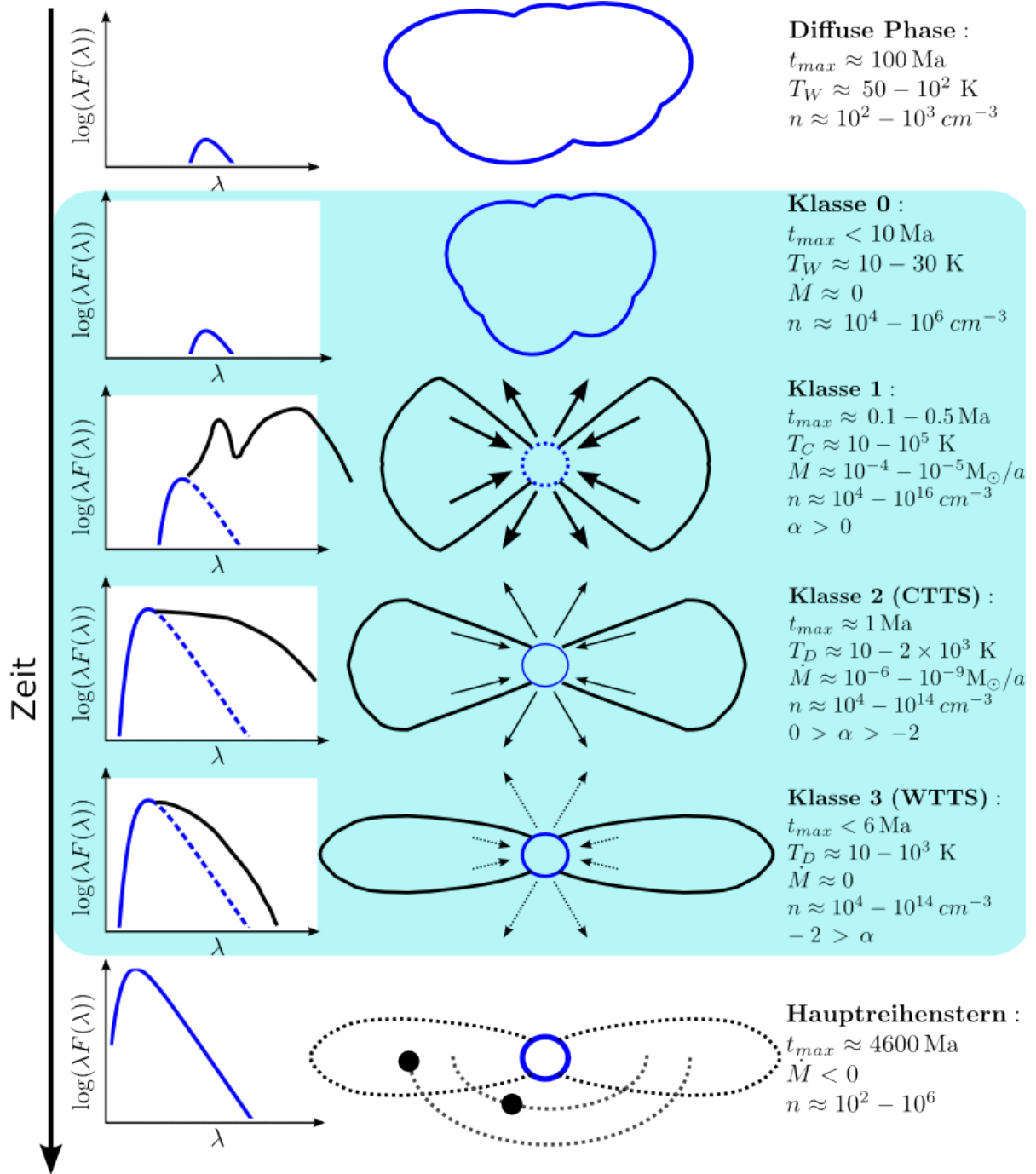
Dissipation immer weiter erodiert, so dass die langwellige Strahlung abnimmt. Wegen der Anfälligkeit dieser Klassifikation gegenüber starker Abschirmung der Strahlenquelle wurden im Laufe der Zeit auch komplexere Methoden entwickelt um die Klassifikation zu verbessern (siehe Diskussion in Nielbock (2001)). Aus der statistischen Häufigkeit der beobachteten Sternentstehungsphasen lassen sich darüber hinaus die Zeitskalen der einzelnen Zustände abschätzen. In Abbildung 1.3 ist die SED Entwicklung eines Sonnenmasse-Sterns qualitativ aufgetragen. Zu jeder Phase ist die entsprechende geometrische Gestalt des jeweiligen Zustandes schematisch dargestellt. Auf die einzelnen Phasen des SN wird in den folgenden Unterabschnitten 1.2.1 bis 1.2.3 genauer eingegangen. Abschnitt 1.3 beschreibt die dynamische Entwicklung nach Ende des SN Stadiums. Das Wissen um diese Entwicklung ist entscheidend, um aus den heutigen Messungen an Körpern des Sonnensystems Rückschlüsse auf deren Entstehungsregion zu erhalten, die dazu beitragen die Plausibilität der SN Hypothese zu verifizieren.

Zum Ende der SN Entwicklung sammelt sich der Hauptteil der Materie im Zentralgestirn an, während ein kleiner Teil potentiell Planeten ausbilden kann. Aus dem Umstand, dass beinahe der gesamte Drehimpuls des Sonnensystems in der Bahnbewegung der Planeten gespeichert ist, während die Sonne den Hauptteil der Gesamtmasse beinhaltet, kann man schließen, dass in der Entstehungsphase ein sehr effektiver Mechanismus zum Transport des Drehimpulses<sup>3</sup> vorhanden gewesen sein muss (Fahr, 1981). Der Endzustand des SN ist ein von Staub und Gas weitestgehend befreites Planetensystem mit einer Anzahl an Planeten und kleineren Körpern. Da dieses System mit mehreren Milliarden Jahren eine weit längere Lebensdauer aufweist als die Summe der Stadien des SN, wird dieses hier als Endzustand angesehen, obwohl natürlich weiterhin verschiedene dynamische Prozesse ablaufen. Nach Dissipation des Nebels entwickelt sich das Zentralgestirn entlang der Hauptreihe. Seine Entwicklung wird im Wesentlichen durch interne Parameter wie Masse, Luminosität, Radius und Kerntemperatur bestimmt (Kippenhahn & Weigert, 1990).

---

<sup>3</sup>Der genaue Transportmechanismus ist noch nicht vollends verstanden. Bekannte Details werden in Abschnitt 2.4 diskutiert.





**Abb. 1.3.:** Entwicklung eines Sonnenmasse-Sterns  $M \approx M_{\odot}$ . In der linken Spalte ist seine sich mit der Zeit ändernde SED aufgetragen. Dabei korrespondiert die Farben Blau und Schwarz des jeweiligen Astes des Funktionsverlaufs mit der in der mittleren Spalte schematisch dargestellten Herkunftsregion der Strahlung. Der Basisverlauf (blaue Linie) ist jeweils der eines schwarzen Strahlers. In einigen Phasen wird dieser jedoch stark durch sekundäre Effekte, wie die Streuung durch den Staub, modifiziert (schwarze Linie). In der rechten Spalte sind einige kennzeichnende physikalische Parameter angegeben, wobei die Zahlenwerte auf Hartmann (2000) basieren. Die hellblau hinterlegten Zustände werden mit der Solaren Nebel Hypothese (Abschnitt 1.2) beschrieben.

### 1.2.1. Wolkenkern

Innerhalb der Solaren Nebel Hypothese formen sich aus den diffusen Wolken regionale Verklumpungen mit ein bis zwei Größenordnungen höherer Dichte gegenüber dem übrigen Material. Diese Wolkenkerne sind relativ homogene, kugelförmige Gebilde aus Gas und Staub mit ca.  $\geq 10.000$  AU Durchmesser, welche sich über thermischen Druck gegenüber der Eigengravitation stabilisieren. Die mathematische Beschreibung kann über Gleichungen der Hydrostatik erfolgen, wird jedoch durch die komplizierte Strahlungswechselwirkung mit der Umgebung (interstellares Strahlungsfeld, ISRF) ein komplexes Problem (Launhardt et al., 2013). Dabei heizen hochenergetische UV-Strahlung sowie schnelle kosmische Partikel (CRP) das Gas auf, welches sich wiederum durch Linienemission und Kontinuummmission (Wärmestrahlung) des Staubes abkühlen kann. Durch die Interaktion mit dem ISRF wird der Staub beschleunigt und bildet Dichtemaxima und filamentäre Strukturen aus. In ruhigen Sternentstehungsregionen mit homogenem Strahlungsfeld wird er Richtung Zentrum des Wolkenkerns beschleunigt und bildet wie die Gassphäre eine näherungsweise kugelsymmetrische Form aus (Kupper, 2014). Der Staub schirmt das Zentrum dabei gegen die Einflüsse vom ISRF ab, so dass sich der Kern sehr weit abkühlen kann. Da die Temperatur jedoch über den thermischen Druck die Stabilität des Gebildes gewährleistet, kann ein Kern unter Umständen instabil werden (Sipilä et al., 2011).

### 1.2.2. Kollabierender Wolkenkern

Da die Modelle für den Aufbau der Wolkenkerne auf der Annahme eines metastabilen Gleichgewichts zwischen Gravitation einerseits und einer Kombination aus thermischem, magnetischem und zu einem geringeren Anteil turbulentem Druck andererseits basieren, können auch leichte Störungen den Kollaps verursachen. Die speziellen Auslöser können zum Beispiel eine in der Nähe stattfindende Supernova (Johansson & Ziegler, 2013)), ein stark strahlender Stern oder eine, durch interne Instabilität hervorgerufene, weitere Verdichtung sein (Sipilä et al., 2011). Dadurch besteht die Möglichkeit von einer Art Kettenreaktion in Clustern, bei der neu gebildete junge Sterne durch ihren Strahlungsdruck benachbarte Kerne stören und so zum Kollabieren bringen können. Aus den SEDs kann man schließen, dass diese Phase gegenüber der Wolkenkern- und Scheibenphase relativ schnell abläuft (Tscharnutter et al., 2009). Die Zeitskala kann man über die sogenannte “freefall Time“ (die Zeit, in der Material nur unter Einwirkung der Gravitation das Zentrum erreichen würde) abschätzen, welche bei ca.  $10^5$  Jahren liegt. Der Kern kontrahiert in einer ersten Phase noch annähernd isotherm, bis der innere Teil des Nebels optisch

dicht gegenüber seiner Wärmestrahlung wird<sup>4</sup>. Dies wird in Simulationen meist als die Geburtsstunde eines sog. Protosterns angenommen. Innerhalb dieser undurchsichtigen Region entsteht ein quasi hydrostatischer Bereich, der durch einen Akkretionsschock gegenüber weiter einfallendem Material abgegrenzt ist (Gong & Ostriker, 2009). Dies wird als sogenannter "erster Kern" bezeichnet und stellt auch den Beginn des Wachstums der protoplanetaren Scheibe dar. Daraufhin folgt eine Phase adiabater Aufheizung aufgrund der dann fehlenden Kühlungsmöglichkeit durch Strahlungsemission, bis bei ca. 2000K die  $H_2$  Dissoziation einsetzt. Währenddessen wächst der erste Kern, bis das Zusammenspiel des Akkretionsschocks und der daraus folgenden Aufheizung und Abbremsung der Rotation eine zweite Instabilität hervorruft. Falls bei dieser Instabilität die Kondensationstemperatur des Staubes erreicht wird, kommt es zu "Auswürfen" von Material aus der inneren Scheibe und zur Ausbildung optisch dünner Bereiche entlang der Pole. Nach der Dissoziation des Wasserstoffs folgt eine weitere dynamische Kontraktion, welche die sogenannte PMS Phase des Sterns einläutet (Pre- Main Sequence Phase, d.h. bevor ein Stern in die Haupreihe eintritt). Währenddessen kann es im inneren Bereich durch die schnelle Aufheizung zur Emission hochenergetischer Photonen kommen.

Da die kollabierende Region jedoch noch von ihrer Einhüllenden abgeschirmt wird, kann man diese sog. Klasse I Quellen hauptsächlich an dem massiven Infrarotexzess, der durch das Reemittieren der hochenergetischen Photonen durch den Staub ausgelöst wird, und an den austretenden bipolaren Jets (Herbig-Haro Objekte)<sup>5</sup> identifizieren (Kristensen et al., 2012; Pudritz et al., 2007).

### 1.2.3. Protosolare Scheibe

Die Akkretionsscheibe baut sich in der späten Kollapsphase kontinuierlich aus einfallendem Material auf und lässt sich nach Stahler et al. (1994) in drei Bereiche unterteilen: In der äußeren Scheibe bewegt sich das Gas-Staubgemisch auf parabolischen Bahnen schnell Richtung Protostern. In einer dünnen turbulenten Schockzone wird das schnell einfallende Material der äußeren Scheibe abgebremst und auf annähernd kreisförmige Orbits gebracht. Die innere Scheibe besteht aus Material, das sich langsam unter der Einwirkung viskoser Effekte spiralförmig nach innen bewegt und dabei Drehimpuls nach außen abgibt. Je weiter das einfallende Material anfangs vom Zentrum entfernt ist, desto mehr spezifischen Drehimpuls besitzt es. Dies führt dazu, dass zu Beginn des Kollaps nur Material einfällt, welches wegen seiner geringen tangentialen Geschwindigkeitskom-

<sup>4</sup>Als Maß für die Kriterium wird meist der Wert  $\tau = \text{Min}_{\theta,\phi} \int_0^r \rho \kappa dr \geq 2/3$  für die optische Tiefe  $\tau$  gewählt (Schönke & Tscharnuter, 2011).

<sup>5</sup>Die beim Kollaps auftretenden Jets stehen möglicherweise im Zusammenhang mit der lokalen interstellaren Magnetisierung. Siehe Diskussion in Combet & Ferreira (2008)

ponente direkt auf die Oberfläche des Kerns fallen kann (Kollapsphase siehe Abschnitt 1.2.2), während später einfallendes Material den Stern verfehlt und sich stattdessen in einer wachsenden protoplanetaren Scheibe anlagert. Die Scheibe entsteht, weil sich Materialströme aus verschiedenen Teilen der Einhüllenden auf ihren parabolischen Bahnen kreuzen und folglich turbulent interagieren. Diese Scheibe ist in der folgenden Zeit die einzige direkte Quelle für Materialeinfall auf den Stern. Ihre Geometrie kann dabei eine auffächernde Struktur zeigen: Die Scheibenhöhe über der Mittelebene nimmt mit zunehmendem Radius überproportional zu (D'Alessio et al., 1998). Die Scheibe gewinnt an Masse, bis der Einfall von neuem Material aus den Resten der Wolke die Akkretion durch den Stern nicht mehr kompensieren kann. Ebbs der Einfall von Material aus der einhüllenden Wolke schließlich ab, hat sich um die Protosonne eine dicke, optisch dichte Scheibe ausgebildet. Die Scheibe wird im Folgenden aufgrund weiterer Akkretion durch den Stern, polare Ausflüsse und Evaporation teilweise wieder abgebaut und dabei sowohl geometrisch als auch optisch dünner. Sie breitet sich jedoch radial weiterhin aus um der Drehimpulserhaltung zu genügen. Aufgrund der unterschiedlichen Bahngeschwindigkeit radial benachbarter Scheibenringe wechselwirken diese über ihre Viskosität miteinander, wodurch Drehimpuls nach außen abgegeben wird, während Materie nach innen fließt. Eine Schwachstelle dieses Modells ist, dass der genaue Viskositätsmechanismus bis dato nicht abschließend spezifiziert werden kann (mehr dazu in Abschnitt 2.4).

Das Material an den Polen, die entlang der resultierenden Drehachse der ursprünglichen Wolke entstehen, ist durch die Einwirkung der beim Kollaps auftretenden Jets bereits verschwunden und erlaubt unter gewissen Winkeln einen Blick auf die Protosonne. Auch der Einfall von Material auf den Zentralkörper aus der Scheibe ist im Vergleich zur Kollapsphase mit  $10^{-5} - 10^{-8} M_{\odot}/a$  relativ gering. Die Protosonne bezieht die Energie für ihre fortwährende Aufheizung hauptsächlich aus der dynamischen Kontraktion nach dem zweiten Kollaps, der durch eine bei der Dissoziation des  $H_2$  hervorgerufenen Instabilität einsetzt (Schönke & Tscharnuter, 2011). In dieser Phase wird sie auch PMSS (Pre Main Sequence Star) genannt, ist weniger als eine Million Jahre alt, besitzt eine Masse zwischen 0,07 und 3 Sonnenmassen und zeigt T-Tauri Akkretion (Hartmann, 2000). Mit dem Einsetzen der Fusion von Wasserstoff zu Helium bei einer Zentraltemperatur von ca.  $3 \times 10^6$  Kelvin (Henning & Semenov, 2013) tritt der Stern nach ca. 100 Ma in die Hauptreihe als Stern der Spektralklasse F bis M ein. Auch zuvor schon handelt es sich bei den T-Tauri Sternen um sehr helle Objekte, da zur Eigenemission des Sterns die Emission der inneren Scheibe hinzukommt. Diese überstrahlt die junge Sonne im Allgemeinen noch um Größenordnungen und bezieht ihre Energie aus der viskosen Reibung als Folge der Akkretion (Hartmann, 2000).



## 1.3. Dynamische Entwicklung des Sonnensystems nach Dissipation des Scheibengases

Da viele Argumentationen bezüglich der Entstehung von Planetensystemen auf Untersuchungen unseres eigenen Sonnensystems beruhen, wird hier auch die späte Phase der dynamischen Entwicklung des Sonnensystems kurz dargestellt. Aus Beobachtungen in unserem eigenen Sonnensystem lassen sich zusätzlich viele Hinweise auf die Entwicklung Solarer Nebel finden. Auch ist unser Sonnensystem das einzige Planetensystem, von dem wir mittels geologischer Untersuchungen mehr als über seinen Ist-Zustand, d.h. über einen Teil seiner Historie lernen können.

Vor 4.567–4.568 Milliarden Jahre kondensierten die ersten festen Stoffe aus dem heißen Gasnebel der kollabierten Wolke (Connelly et al., 2012), aus der unser Sonnensystem entstand. Dynamische Betrachtungen geben Grund zu der Annahme, dass sich die großen Gasriesen danach innerhalb von 1 – 2 Millionen Jahren formten, bevor sich die Gasscheibe endgültig verflüchtigte. Der Jupiter entstand dabei an der vermuteten Kondensationslinie (Snowline), an der die Oberflächendichte festen Materials am höchsten war (siehe Abb. 1.4 und Beschreibung). Dort war genügend Material vorhanden um seinen Kern von ungefähr  $10M_{\oplus}$  auszubilden. Die Bahnen der Protoplaneten waren zu diesem Zeitpunkt bereits stationär, es fand also keine sogenannte Typ I Migration mehr statt. Erst als ihre Masse durch Kollisionen mit anderen Protoplaneten  $30 - 50M_{\oplus}$  überschritt, begann die sogenannte Typ II Migration und eine Bewegung in Richtung Scheibenzentrum setzte ein<sup>6</sup>. Danach bildeten sich die terrestrischen Planeten innerhalb von 10 – 100 Millionen Jahren aus der Scheibe aus hauptsächlich S-Typ Planetesimalen. Diese Scheibe war wahrscheinlich nach außen auf 1 AU begrenzt (Hansen, 2009). Dies wurde durch den, während seines Wachstumsprozesses inwärts migrierenden, Jupiter verursacht, dessen Bewegung Richtung Zentrum sich erst umkehrte, als er von dem sich später bildenden Saturn in einer 3 : 2 Resonanz (MMR) gefangen wurde und sich auf seine heutige Position bewegte (Walsh et al., 2011). Bei dieser Auswärtsbewegung streute er zusätzlich noch C-Typ Planetesimale, die sich außerhalb der Eislinie ( $\sim 2,7$  AU) gebildet hatten und so reicher an volatilen Substanzen waren. Ungefähr 1% von ihnen landete dabei am äußeren Rand des heutigen Hauptasteroidengürtels sowie 10% auf exzentrischen Bahnen, die den Erdborbit kreuzten und so möglicherweise zu einer späten, als "Late Veneer Accretion Period" (LVAP) bezeichneten Akkretionsphase beigetragen haben. Der Asteroidengürtel setzt sich demnach in einem Verhältnis von etwa 3 : 1 (Mothé-Diniz et al., 2003) aus zwei getrennten Populationen von volatil ärmeren Körpern (S-Typ) mit Entstehungsregionen innerhalb von 3 AU und volatil

<sup>6</sup>Siehe Armitage (2007) für einen Überblick über Typ I und II Migration

reichen Körpern (C-Typ) jenseits 5 AU zusammen (Walsh et al., 2011). Ein Teil der S-Typen wurde durch die Migrationsvorgänge der Riesenplaneten außerhalb des heutigen Sonnensystems in die "Scattered Disk" ( $30 - 10^3$  AU) (Morbidelli et al., 2004) und die Oortsche Wolke ( $10^3 - 10^5$  AU) gestreut (Alan Stern, 2003). Ersteres Gebiet wird heute als die Ursprungsregion von Kometen der Jupiter- (JFCs) und Halley-Familie (HTCs) angesehen, während letzteres als Reservoir der langperiodischen Kometen (LPCs) bzw. Kometen aus der Oortschen Wolke (OCCs) in Betracht kommt (Brasser & Morbidelli, 2013; Emel'yanenko et al., 2013). Dabei ist zu beachten, dass die Entstehungsregion der LPCs/OCCs weiter innen angenommen wird<sup>7</sup> als die der JFCs/HTCs, obwohl die erstgenannten heutzutage weiter außen anzutreffen sind. Als Auslöser für diese Migration wird die starke gravitativ Wechselwirkung mit Jupiter angesehen. Die Jupiter- und Halley-Familien unterscheiden sich zwar in ihrer Aktivität bei Sonnenannäherung, sind aber sehr ähnlich zusammengesetzt (A'Hearn et al., 2012), was ein weiteres Indiz für eine ähnliche Entstehungsregion darstellt.

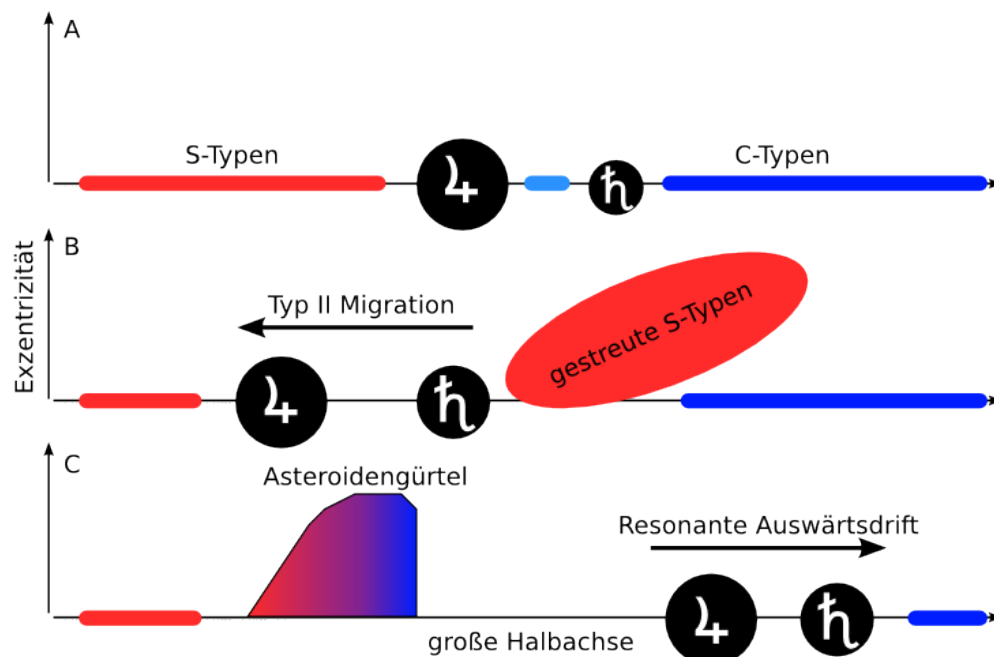
Aus radiometrischen Daten von großen Einschlagskratern auf dem Mond<sup>8</sup> kann eine Häufung von Einschlägen vor ungefähr  $4,1 - 3,8 \times 10^9$  Jahren ermittelt werden (Bottke et al., 2012). Da angenommen wird, dass sich zu diesem Zeitpunkt die Orbits der Planeten bereits weitgehend stabilisiert hatten und somit keine großen Materieflüsse mehr stattfanden, wird diese Ära mit einer Instabilität wie z.B. einer nahen Planeten-Planeten Begegnung in Verbindung gebracht (Levison et al., 2011), die das Planetensystem genug störte um diesen späten Materiefluss auszulösen. Es ist also möglich, dass auch zu einer relativ späten Phase des Sonnensystems Körper auf exzentrischen Bahnen aus abgelegenen Regionen zur Komposition der inneren Planeten beigetragen haben. Dieses Ereignis wird allgemein als "Late Heavy Bombardement" (LHB) bezeichnet.

## 1.4. Habitabilität und Leben

Wasser spielt in den meisten Definitionen für die Habitabilität von Planeten eine Hauptrolle, und ist vor allem für viele biologische Prozesse von entscheidender Bedeutung. Auf dem Staub auskondensiertes Wassereis kann die Koagulation begünstigen, und so im frühen SN zur Bildung von Planetesimalen beitragen. Außerdem wird die Tektonik auf Planeten maßgeblich vom Wasser beeinflusst. Die Existenz und Verteilung von

<sup>7</sup>wegen ihres mit dem Saturnmond Enceladus übereinstimmenden  $D/H$  Verhältnisses (Kavelaars et al., 2011)

<sup>8</sup>Der Mond kann wegen seiner geringen Erosion wichtige Aufschlüsse über die Anzahl und Größenverteilung der Einschläge in der Erdregion geben.



**Abb. 1.4.:** Evolution der planetesimalen Scheibe durch die Migration der Riesenplaneten Jupiter  $J_4$  und Saturn  $J_h$ . Aufgetragen sind drei zeitlich aufeinander folgende Zustände:

- Anfangskonfiguration mit  $R_{J_4} \approx 3,5 AU$  und  $R_{J_h} \approx 4,5 AU$
- Zeitpunkt der dichtesten Annäherung an die Sonne mit  $R_{J_4} \approx 1,5 AU$  und  $R_{J_h} \approx 2 AU$
- Ungefäher heutiger Zustand mit  $R_{J_4} \approx 5,2 AU$  und  $R_{J_h} \approx 9,5 AU$

Durch die einwärts gerichtete Migration der Riesenplaneten wurde der äußere Radius der inneren planetesimalen Scheibe auf  $\approx 1 AU$  begrenzt und Material aus dem inneren Sonnensystem in die äußeren Regionen gestreut. Nachdem sich Saturn und Jupiter durch ihre Wechselwirkung (2:3 Resonanz) wieder von der Sonne entfernten, entstand der Asteroidengürtel aus einer Mischung aus S-Typ Planetesimalen aus dem inneren Sonnensystem und C-Typ Planetesimalen mit Entstehungsregionen jenseits der Riesenplaneten, die durch den neuerlichen Migrationsvorgang nach innen gestreut wurden.

Abbildung und Deutung basieren auf Walsh et al. (2011).

Wasser ist also in vielen Fragestellungen ein zentraler Punkt. Auch ist mittlerweile durch viele Studien belegt, dass Wasser ein verbreitetes Phänomen im Universum ist. Schon in der frühen Phase der molekularen Wolken ist es bis zu einer Konzentration von  $10^{-4}$  relativ zu Wasserstoff vorhanden (Herbst & Dishoeck, 2009). Dieses Wasser entsteht durch die katalytische Einwirkung des Staubes schon vor dem Kollaps. Der direkte Nachweis

war jedoch lange Zeit schwierig, da wegen des Ausfrierens des Wassers auf den Staub die Konzentration in der Gasphase unterhalb der Detektionsgrenze lag (Bergin et al., 2010). Jüngst ist jedoch der direkte Nachweis gelungen (Caselli et al., 2012).

In welchem Umfang Wasser im Solaren Nebel gebildet wird, hängt jedoch stark von den Eigenschaften der Entstehungsregion des SN ab (Herbst & Dishoeck, 2009) (siehe auch Abschnitt 1.2). Auch für spätere Phasen wurde Wasserdampf sowohl in den inneren Zonen von Protoplanetaren Scheiben, als auch in deren Atmosphären in hoher Konzentration nachgewiesen (Carr & Najita, 2008; Hogerheijde et al., 2011; Zhang et al., 2013). Selbst in alten Sternen der Spektralklassen A-F existieren noch starke Hinweise auf die Präsenz von Wasser in ihren Planetensystemen (Farihi et al., 2013). Neben dem historischen Wasser aus der Eisphase des Wolkenkerns kann es während der adiabatischen Kontraktion der Wolke in der “Hot Corino” Region durch Neutral-Neutral-Reaktionen produziert werden (siehe Abschnitt 2.1.1), die vorher wegen der geringen thermischen Geschwindigkeit nicht möglich waren (Kupper et al., 2012).

Auch in unserem Sonnensystem ist Wasser sehr verbreitet. Es wurde sowohl in den äußeren Regionen, auf Kometen (Mumma & Charnley, 2011) und den Monden der Riesenplaneten (Clark et al., 2013), als auch auf den inneren terrestrischen Planeten in verschiedenen Studien nachgewiesen. Auf dem Mars existieren große Mengen Wassereis in den Polregionen (Villanueva et al., 2015) und selbst auf Merkur wurde es in abgeschatteten Kratern detektiert (Lawrence et al., 2013). Die Frage wie und wann welche Anteile dieses Wassers auf die inneren Planeten unseres Sonnensystems gekommen sind, hat eine lange Geschichte in der Wissenschaft. Die verschiedenen angenommenen Szenarien haben sich dabei in ihrer Gewichtung immer wieder verschoben (Kotwicki, 2009). Es lassen sich hauptsächlich zwei Ansätze unterscheiden:

- Trockene Akkretion unter Bedingungen, die eine Anlagerung volatiler Substanzen nicht zuließen (Albarède, 2009), mit anschließender Volatilisierung durch externe Prozesse.
- Feuchte Akkretion (Drake & Richter, 2002; Raymond et al., 2007) aus hydrierten Mineralien mit möglicherweise späterem extraterrestrischen Beitrag.

Mit Wassergehalt ist dabei nicht nur die flüssige Phase auf der Oberfläche und Atmosphäre gemeint, sondern auch Grundwasser, dichte, wasserhaltige Mineralien und unter großem Druck in normalerweise wasserfreien Mineralien (wie Olivin) gelöstes Wasser (Lécuyer et al., 1998). Der totale Wassergehalt der Erde wird in dieser Betrachtung mit bis zu 10 Erdozeanen angegeben (Raymond et al., 2007), wobei  $1M_{\text{Erdoz}} \approx 1,4 \times 10^{21} \text{ kg}$ . Dabei bestehen jedoch große Unsicherheiten in Bezug auf die Speicherkapazität hydrophiler Mineralien im Erdmantel (Ohtani, 2005). Die Verteilung von Wasser innerhalb des Sonnensystems ist also nicht nur durch die Kondensationssequenz (TCS) der Elemente

beim Abkühlen der Scheibe bestimmt, sondern kann potentiell auch durch viele, spätere Transportprozesse beeinflusst werden.

Dass der volatile Beitrag von kosmischen Einschlägen für die Atmosphäre eines Planeten in den meisten Fällen positiv ist, wurde unter anderem durch die Studie von Niem et al. (2012) belegt. Im Falle der Erde besteht jedoch zusätzlich die Unsicherheit bezüglich des großen Planetaren Einschlags, der möglicherweise zur Bildung des Mondes geführt haben soll (Zahnle et al., 2010) und seiner Wirkung auf die Atmosphäre.

Im Folgenden werden die Möglichkeiten des Wassertransportes innerhalb des Sonnensystems beschrieben und bewertet.

### **Wassertransport durch Kometen**

Historisch wurden Kometen lange als wahrscheinlichster Kandidat für Transportprozesse von Wasser angesehen, da Wasser einer ihrer Hauptbestandteile ist (Mumma & Charnley, 2011). Als durch die Messungen des  $D/H$  Verhältnisses an OCCs festgestellt wurde, dass deren Verhältnis zu stark vom Erdwert abwich, wurde ihr Beitrag zum Erdwasser auf maximal 50% vermutet (Drake, 2005). Mit der Entdeckung von  $D/H$ -kompatiblen Kometen der Jupiter-Familie (Hartogh et al., 2011; Lis et al., 2013) wurde die Diskussion erneut angeheizt. Ein weiterer Punkt, der gegen Kometen als Wasserlieferant spricht, ist die im Vergleich zu Kometen geringe Edalgaskonzentration auf der Erde (Marty et al., 2013). Dies begrenzt ihren Beitrag zum Erdwasser auf 10%, falls sich die Erdatmosphäre zwischenzeitlich nicht grundlegend geändert hat (Zahnle et al., 2010). Desweiteren gibt es wenig Hinweise darauf, dass Kometen während der frühen Entstehungsphase der inneren Planeten (LVAP) eine bedeutende Rolle gespielt haben (Drake & Righter, 2002; Morbidelli et al., 2000). Dies liegt an ihrer geringen dynamischen Lebensdauer und der daraus resultierenden geringen Einschlagswahrscheinlichkeit.

Andererseits könnte es während des LHB durchaus zu einem Beitrag von bis zu 10% durch Kometen der JFC und HTC gekommen sein (Morbidelli et al., 2000). Der Nachweis von Wasser in verschiedenen Mondgesteinen mit ähnlicher Deuterium-Signatur scheint einen signifikanten Beitrag von Kometen zum Wassergehalt im Erde-Mond-System zu bestätigen (Greenwood et al., 2011).

### **Wassertransport durch Asteroiden**

Dynamische Simulationen zeigen, dass es schon in der Akkretionsphase möglich ist innere Planeten mit ausreichendem Wasserinventar aufzubauen (Raymond et al., 2007), falls anfänglich alle Planetesimale außerhalb von 2.5 AU mit einem Wasserinventar von

5% ausgestattet werden. Asteroiden werden nach ihren spektroskopischen Eigenschaften in verschiedene Klassen eingeteilt, die eine Vielzahl möglicher Zusammensetzungen implizieren. Über 90% der Gesamtpopulation bilden die eher trockene S-Klasse und die an volatilen Substanzen reichere C-Klasse, wobei letztere hauptsächlich um den äußeren Teil des Asteroidengürtels konzentriert ist (Gradie et al., 1989) (siehe Abschnitt 1.3 bzw. Abb 1.4). Falls man die heute beobachtbaren Asteroiden-Familien zugrundelegt, besteht der Hauptteil der möglichen Impaktoren vermutlich eher aus trockenem Material (Walker et al., 2002). Nur ein geringer Anteil der Asteroiden gehört der volatil reichen Familie der undifferenzierten kohligen CI Chondriten an (Albarede et al., 2013), deren vermuteter Beitrag zur Erdmasse sich auf 1–4% beläuft (Albarede et al., 2013; Marty et al., 2013). Letztgenannter Beitrag trifft dabei während der zweiten Phase der Erdentstehung ein, sodass ihr volatiler Eintrag erhalten geblieben sein dürfte. Bei einem angenommenen Wasseranteil von  $\lesssim 20\%$  (Alexander et al., 2012) dieser Körper führt das zu einer maximalen Liefermenge in Höhe vom heutigen Gesamtwassergehalt der inneren Planeten (O’Brien et al., 2014). Aus dem Osmium  $^{187}\text{Os}/^{188}\text{Os}$  Verhältnis ist jedoch abzuleiten, dass kohlige CI Chondriten nicht die Quelle der LVAP sein können (Drake, 2005), und damit auch möglicherweise nicht die Quelle des Erdwassers sind. Da die Asteroiden starke Hinweise auf wiederholte Homogenisierung durch Schmelzvorgänge enthalten, sind in ihnen nicht mehr viele Hinweise auf ihre Herkunft zu finden (Henning & Semenov, 2013).

### **Ausgasen von Wasser aus internen (Planeten-) Reservoiren**

Haben sich die inneren Planeten während ihrer Entstehung zumindest zum Teil aus Planetesimalen gebildet, die Wasserdampf aus dem Gas des Solaren Nebels aufgenommen hatten, kann dieses Wasser durch vulkanische Aktivitäten oder Einschlagsereignisse wieder an die Atmosphäre abgegeben worden sein. Dieses Wasser könnte auch während einer Phase der Magmaozeane ausgedampft und später rekondensiert sein, wie sie für die Erde beim Einschlag des mondformenden Körpers vorgekommen sein könnte. Der Verlust eines Teils der ersten Atmosphäre bei einem solchen Ereignis könnte auch die geringe Präsenz von Edelgasen auf der Erde erklären (Brown, 1949). Das Wasserinventar selbst kann auch bei einem so außergewöhnlichen Einschlag durchaus erhalten geblieben sein (Genda & Abe, 2003, 2005) und entscheidend zum existierenden Gesamtwassergehalt beigetragen haben (Zahnle et al., 2010). Auch Mars und Merkur könnten von diesem Szenario betroffen gewesen sein (Drake, 2005). Letztlich ist hier die Frage, wann sich das Scheibengas relativ zur Planetenentstehung verflüchtigte und wie warm es genau zur Zeit der Entstehung der inneren Planeten war, da die Adsorptionseffizienz des Staubes sich invers zur Temperatur verhält.

### 1.4.1. Die Verteilung von Deuterium im Sonnensystem

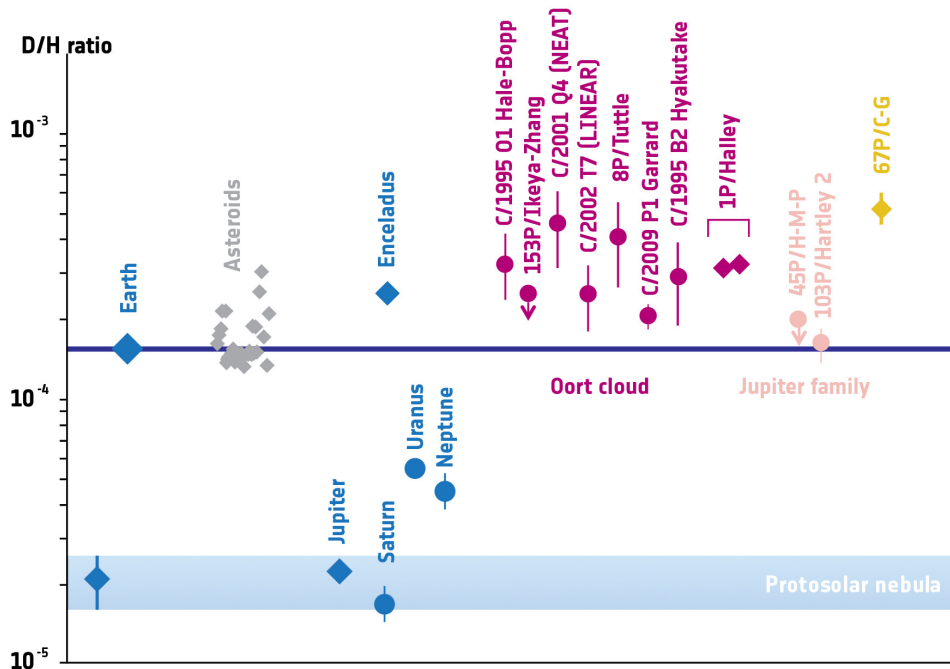
Der relative Anteil von Deuterium liefert wichtige Hinweise, wenn es um die Entschlüsselung der Herkunft des Wassers geht. Da es keine effiziente Quelle für Deuterium im Universum gibt (siehe Abschnitt 1.1), müssen die Anreicherungen, die in Kometen und einigen Planeten beobachtet werden, durch eine isotopische Fraktionierung aufgrund von chemischen Reaktionen erfolgen. Da diese Fraktionierung ein Nichtgleichgewichtsprozess ist, lässt sich über das  $D/H$  Verhältnis auf Historie und Bildungsregion schließen, denen das jeweilige Objekt ausgesetzt war.

Die Verteilung von Deuterium im Sonnensystem ist widersprüchlich. Aus spektroskopischen Untersuchungen der Gasriesen Jupiter und Saturn lassen sich, ähnlich wie bei den Eisriesen, Werte ableiten, die zu denen des ISM und dem vermuteten protosolaren Wert kompatibel sind<sup>9</sup>. Sternbildungsregionen wie kalte Kerne oder warme Einhüllende zeigen jedoch bis um den Faktor 300 höhere Werte vergleichbar mit denen der OCCs. Falls dies so auch im Vorläufer unseres Sonnensystems der Fall war, könnte ein Teil dieses angereicherten Materials im Verlauf der Scheibenphase von den sich bildenden Protoplaneten aufgenommen worden sein und sich so angereichert haben. Dies würde insbesondere auf Kometen zutreffen, von denen angenommen wird, dass sie sich in ähnlichen radialen Abständen (und damit unter ähnlichen Bedingungen) gebildet haben wie die Gasriesen (vergl. Abb. 1.5 (Kavelaars et al., 2011) und zu den ursprünglichsten Körpern im Sonnensystem gehören (Mumma & Charnley, 2011). Es ist jedoch fraglich, ob die meist spektroskopischen Messungen von Kometen wirklich das interne  $D/H$  Verhältnis akkurat wiedergeben und nicht durch differenzielle Diffusion verfälscht werden (Drake, 2005). Aufschluss hierüber können in-situ-Messungen, wie die der Rossetta Mission, bringen. Modellrechnungen deuten jedoch darauf hin, dass das gemessene, hohe  $D/H$  Verhältnis nicht allein in der Scheibe entstanden sein kann (Cleeves et al., 2014). Daraus lässt sich schließen, dass die früheren Phasen des SN zur Klärung dieser Frage miteinbezogen werden müssen. Dass Kometen Material aus Zeiten vor dem Ende des Materieeinfalls aus der Einhüllenden beinhalten können, wurde von Yang & Ciesla (2012) gezeigt.

Eine Zusammenfassung des heutigen Wissensstands über mögliche Wasserquellen, ihre jeweils vermutete Ursprungsregion und ihre  $D/H$ -Verteilung ist in Tabelle 1.2 dargestellt. Schon an dieser kurzen Auflistung wird deutlich, dass die Verteilung von Substanzen im Sonnensystem von verschiedenen chaotischen, nichtlokalen Wechselwirkungen bestimmt wird. Um die Frage nach dem Ursprung des Wassers in der Erdregion beantworten zu

---

<sup>9</sup>Spektroskopische oder direkte Messungen des ursprünglichen Deuteriumgehalts in der Sonne sind nicht möglich, da bereits ein Großteil des Deuteriums zu  ${}^3\text{He}$  fusioniert wurde (Drake, 2005). Mithilfe von Modellen kann aber vom  ${}^3\text{He}/{}^4\text{He}$  Verhältnis auf den früheren Wert geschlossen werden (Robert, 2006)



**Abb. 1.5.:** Verteilung von Deuterium im Sonnensystem. Der untere horizontale Balken markiert den Bereich, in dem das Verhältnis von Deuterium zu Wasserstoff im Protosolaren Nebel vermutet wird. Die Werte der Riesenplaneten Jupiter und Saturn sind mit diesem kompatibel. Die Erde zeigt ein wesentlich höheres  $D/H$  Verhältnis von  $1,49 \times 10^{-4}$  ähnlich dem der meisten Asteroiden. Kometen der OCC haben meist einen noch höheren Wert und variieren sehr stark untereinander. JFCs zeigten bisher niedrigere Werten als OCCs, bis der kürzlich von Rosetta vermessene Komet 67P diese Zuordnung auflöste. Quelle: ESA. Daten basieren auf (Altwegg et al., 2014) und internen Referenzen.

können, reicht es also keineswegs aus, sich mit den lokalen Gegebenheiten auseinanderzusetzen. Im Gegenteil, es muss die globale Verteilung bestmöglich bestimmt und über die komplette Historie verfolgt werden.

## 1.5. Stand der Forschung zur numerischen Modellierung

Die numerische Modellierung hat sich mittlerweile fest als drittes Standbein der Forschung neben experimentellem Nachweis und analytischer Theorie etabliert. Gerade in der Astrophysik ist ihr Nutzen gewaltig, da die Entfernungen und Zeitskalen den experimentellen Zugang zum Teil sehr erschweren und sie manchmal sogar die einzige Möglichkeit zur Validierung einer Theorie darstellt. Im Folgenden soll ein Überblick



Reservoir	Gesamtmasse [ $M_{\oplus}$ ]	Massenanteil Wasser	D/H Verhältnis [ $\times 10^{-6}$ ]	Quellregion [AU]
Erde	1	0,0014 (1)	$149 \pm 3$ (4)	1 – 4
LVAP				
Asteroiden	1 – 20% (7)	0,1 (3)	140 (5)	< 3
Innere Kometen	2 – 3% (7)	0,1 – 0,3 (8)	155 – 200 (2,6)	5 – 10
Äußere Kometen	0.5 – 1% (7)	0,1 – 0,3 (8)	300 (5)	> 10
LHB				
Asteroiden	$5 \times 10^{-3}$ (9,10)	< 0,2 (3)	$140 \pm 10$ (5)	1,5 – 5
Kometen	$5 \times 10^{-4}$ (9,10)	0,1 – 0,3 (8)	155 – 300 (2,5)	> 5

**Tabelle 1.2.:** Wasserquellen in der Akkretionsgeschichte der Erde. Der Massenanteil des Wassers bezieht sich auf die Gesamtmasse des jeweiligen Körpers, wobei der Wassergehalt der Erde insgesamt  $6M_{\text{Erdoz}}$  entspricht. Die Quellregion der Körper, die einen Beitrag zum Erdwasser geleistet haben, beschreibt deren radialen Abstand zum Zentralkörper zur Zeit der planetesimalen Scheibe. Für die inneren Kometen der LVAP wurde das  $D/H$  Verhältnis der JFCs angenommen, für die äußeren Kometen dasjenige der OCCs. Während des LHB bestehen große Unsicherheiten in Bezug auf den Beitrag der Kometen zur Erdentstehung, so dass hier keine Aufschlüsselung in ihre Ursprungsregion erfolgen kann. Die Zahlenwerte entstammen folgenden Quellen:

- |                               |                              |
|-------------------------------|------------------------------|
| (1) (Ohtani, 2005)            | (2) (Hartogh et al., 2011)   |
| (3) (Raymond et al., 2013)    | (4) (Lécuyer et al., 1998)   |
| (5) (Robert, 2006)            | (6) (Lis et al., 2013)       |
| (7) (O’Brien et al., 2014)    | (8) (Mumma & Charnley, 2011) |
| (9) (Morbidelli et al., 2000) | (10) (Brož et al., 2013)     |

über den momentanen Stand der Forschung im Bereich der numerischen Modellierung des Solaren Nebels gegeben werden.

### 1.5.1. Modellierung der Wolke

Die chemische Simulation von Wolkenkernen war bis vor kurzem auf nulldimensionale Analysen (Wakelam et al., 2006) oder auf einen sehr kompakten Satz an Reaktanten beschränkt. In jüngerer Zeit sind jedoch radial abhängige Modelle mit komplexen chemischen Netzwerken hinzugekommen (Sipilä, 2012). Das selbstkonsistente Model von Kupper (2014) beinhaltet zusätzlich die detaillierte Betrachtung der Staubbewegung bei stärkeren externen Strahlungsquellen. Dabei wird für den Staub in der Wolke eine reali-

stische Größenverteilung angenommen. Da der Staub sowohl für die Opazität, und damit für das Eindringen der Strahlung in den Kern, als auch als katalytische Oberfläche für die Wasserproduktion entscheidend ist, wird in dieser Arbeit auf dem Ansatz von Kupper (2014) aufgebaut. Das zugrundeliegende Modell wird in Abschnitt 2.2 beschrieben.

### 1.5.2. Modellierung des Kollaps

Der Kollaps stellt für die Modellierungsversuche eine besondere Herausforderung dar, da hier neben der Größe des Rechengebiets eine hohe räumliche Auflösung vonnöten ist, um die Entstehung der Protosonne abzubilden (Tscharnuter et al., 2009). Nur wenige Simulationen kommen dabei über die Phase des ersten Kerns hinaus und erreichen dennoch nicht den Zustand einer voll ausgebildeten Akkretionsscheibe (Schönke & Tscharnuter, 2011). Studien, die sich diesem Problem annehmen, müssen naturgemäß Abstriche in Bezug auf die Komplexität in Kauf nehmen (Banerjee et al., 2004), haben jedoch zu dem in Abschnitt 1.2.2 beschriebenen Entstehungsmodell, der SN Hypothese, beigetragen.

Die Pionierstudien von (Aikawa et al., 2012; Visser et al., 2009, 2011) bildeten die ersten Versuche den Einfluss des Kollapses auf die Scheibenphase auch chemisch aufzulösen. Wegen des zusätzlichen Aufwands für die Modellierung der chemischen Netzwerke, basieren viele Studien auf dem analytischen Grundgerüst einer selbstähnlichen Lösung. Dadurch ist es möglich, die sich bildende Scheibe in Bereiche ähnlicher chemischer Historien einzuteilen. Es zeigte sich, dass alle bis auf die äußersten Bereiche signifikante Änderungen gegenüber dem Ausgangszustand durchlaufen, sowie, dass sich die resultierende Scheibe anfangs allgemein im chemischen Nichtgleichgewichtszustand befindet.

Ein volles 3D MHD Modell für den Kollaps bis zur Formation des ersten Kerns wurde von Hincelin et al. (2013) präsentiert. Nach diesem Modell konserviert der Kollaps weitgehend die chemische Komposition aus der Wolkenphase, mit Ausnahme weniger Spezies. Aus Beobachtungen an extrasolaren Quellen ist jedoch bekannt, dass z.B. Protosterne (Corinos) große Unterschiede im Vergleich zu ihren prästellaren Vorläufern, gerade in Bezug auf ihre Deuterierung, aufweisen (Taquet et al., 2013b). Demzufolge wurde bald auch die Deuteriumchemie in die Modelle integriert.

Taquet et al. (2014) beschreiben den Kollaps eines Wolkenkerns in einem mehrphasigen Modell mit analytischem Dichteprofil und komplexem Gas-Staub-Chemiemodell, das auch das Auffrieren verschiedener Eisschichten auf dem Staubkorn berücksichtigt. Auch diese Simulation endet weit vor dem Einsetzen der T-Tauri Phase. Das in dieser Arbeit verwendete Modell baut auf einem semi-analytischen Ansatz auf, um über möglichst viele räumliche Bereiche und Zeitskalen anwendbar zu bleiben, und wird in Abschnitt

2.3 beschrieben.

### 1.5.3. Modellierung der Scheibe

Die Scheibe ist die am besten untersuchte Phase in der Entwicklung des SN. Die ausgeprägten Unterschiede zwischen den einzelnen Regionen und physikalischen Phänomenen erlauben jedoch auch hier bis dato meist nur die Untersuchung einzelner Aspekte. Ein vollständig selbstkonsistentes Modell mit chemisch-dynamischer Strahlungswechselwirkung ist bis heute nicht in Reichweite der Modellierungsmöglichkeiten. Einige richtungsweisende Studien konnten jedoch bemerkenswerte Erkenntnisse liefern. Durch die begrenzte räumliche Auflösung heutiger Teleskope beschränken sich die meisten Studien auf die Reproduktion spektraler Analysen, oder auf die späte, dünne Scheibenphase unter der Annahme, dass sich deren Zustand durch die Untersuchung von Kometen und in höherem Maße verwitterten Asteroiden bestätigen lässt. In beiden Fällen wird oft zu Gunsten komplexerer chemischer Netzwerke auf physikalisch-chemisch entkoppelte Modelle gesetzt (Henning & Semenov, 2013). In der sogenannten Ein-Zonen-Näherung wird nur die radiale Abhängigkeit der Scheibe untersucht. Dafür kann in diesen Modellen eine explizite zeitliche Abhängigkeit der Oberflächendichte zugelassen werden. Ein Beispiel für die erfolgreiche Anwendung dieses Ansatzes stellt das Modell von Dodson-Robinson et al. (2009) dar, mit dem die Oberflächendichte verschiedener volatiler Stoffe und damit das zur Bildung der Riesenplaneten verfügbare Material untersucht wurde. Ein Vorreiter in der physikalischen Modellierung der vertikalen Scheibenstruktur (D'Alessio et al., 2001, 1998) erlaubte es viele Effekte, wie den turbulenten Materialtransport sowie Strahlungsflüsse, zu untersuchen. Auf diesem Modell basieren auch chemische Studien wie etwa die von Semenov (2011), Willacy (2007) & Willacy & Woods (2009), die entscheidend zu unserem heutigen Verständnis der chemischen Scheibenstruktur beigetragen haben (siehe Abschnitt 2.1.4). Durch Kombination mit fortgeschrittenen 3D Monte-Carlo Strahlungscode (Min et al., 2011) wurde ermittelt, dass aufgrund der Intensität der Strahlung der jungen Sonne und der daraus folgenden Erwärmung, ein Großteil der inneren Scheibe staub- und eisfrei sein muss. Große Aufmerksamkeit wird auch der detaillierten Modellierung des Strahlungstransfers zwischen Gas und Staub unter Einbeziehung von Koagulationsprozessen gewidmet (Akimkin et al., 2013). Einen guten Kompromiss aus Rechenaufwand und Genauigkeit für stationäre 2D Modelle bilden auch hier noch semi-analytische Modelle wie Takeuchi & Lin (2002), mit dem die räumliche Verteilung des Staubes in der Scheibe ermittelt werden konnte. Volle 3D Hydrodynamik-Codes wie der von Boss (2005) können bis heute nur

Ausschnitte der ungefähr 1 Ma dauernden Entwicklung der Scheibenphase abbilden, und werden deshalb bis dato nicht zur chemischen Modellierung verwendet. Andere nicht achsensymmetrische Modelle wie Ilee et al. (2011), die durch die Berücksichtigung von Selbstgravitation wichtige Hinweise auf die frühe Scheibenphase zur Zeit der Entstehung der Riesenplaneten geben können, sind ebenfalls veröffentlicht worden. Ein fortgeschrittenes, weitgehend selbstkonsistentes 2D Modell mit wenigen Dutzend Spezies ist zwar von Tscharnuter & Gail (2007) präsentiert worden, konnte aber wegen der wenigen testbaren Aussagen noch nicht Fuß fassen.

Weitere Modellierungsversuche sind zu vielfältig, als dass sie hier im Detail wiedergegeben werden können. Daher wird für eine umfassendere Diskussion auf das aktuelle Review Paper von Henning & Semenov (2013) zu diesem Thema verwiesen. Wegen der gemeinsamen Zielsetzung mit der vorliegenden Arbeit sollen lediglich einige jüngere Studien erwähnt werden, die sich mit dem  $(D/H)_{H_2O}$  Verhältnis beschäftigt haben: Von Du & Bergin (2014) wurde die Konzentration von Wasserdampf in einem TW Hya ähnlichen System untersucht. Die Ergebnisse zeigen eine hohe Konzentration von Dampf in einem dünnen Ring innerhalb von wenigen AU um den Protostern, sowie die Präsenz von kaltem Wasserdampf in der Atmosphäre der Scheibe. Die innere Grenze dieses Rings wird dabei durch die Abschirmung von dissozierenden UV Photonen, die äußere durch die Rekondensationstemperatur bestimmt. Dies passt zu spektralen Fits an diesem System (Zhang et al., 2013), sowie zu dem aus den Spektren abgeleiteten Gesamtwassergehalt (Hogerheijde et al., 2011). Die Studie von Furuya et al. (2013) untersucht, in wie weit der vertikale Zyklus aus Photodesorption in der Atmosphäre und Rekondensation im Inneren der Scheibe das  $D/H$  Verhältnis von Wasser reduzieren kann. Die Autoren schließen, dass dieser Zyklus im Inneren der Scheibe sehr effizient den anfänglich hohen Deuterium-Anteil innerhalb von  $10^6$  Jahren um mehr als eine Größenordnung reduziert. Auch in den äußeren Teilen der Scheibe ist der Vorgang wirksam, ohne sich jedoch auf den totalen Wassergehalt im selben Maße auszuwirken. Yang et al. (2013) beziehen in ihrem Modell für den Solaren Nebel den Einfall von Materie aus der einhüllenden Wolke mit ein. Dabei wird das  $D/H$  Verhältnis von anfänglich einfallendem Material schnell equilibriert und die Materie durch radialen Transport in die äußeren Regionen gebracht, während sie durch den Einfall von hochdeutერიertem Wolkenmaterial in der mittleren, zentrifugalen Zone ersetzt wird. Dies führt zu einem nicht monotonen Verlauf des  $D/H$  Verhältnisses mit einem Maximum bei mittlerem Abstand zwischen Protostern und Scheibenrand. Dieser Verlauf kann auch über die Lebensdauer der Scheibe bestehen bleiben. Albertsson et al. (2014) haben die Unterschiede zwischen laminarem und turbulentem Materialtransport verglichen. Es zeigte sich, dass die Verteilung der Spezies stark durch den diffusiven

Transport bestimmt wird und bei dessen Berücksichtigung besser mit den beobachteten Isotopenverhältnissen in Kometen übereinstimmt. Auf weitere Einzelheiten dieser Modelle im Unterschied zur vorliegenden Studie wird in den jeweiligen Abschnitten 2 bzw. in der Diskussion (Abschnitt 2.4) eingegangen.

#### 1.5.4. Modellierung der Zusammensetzung der terrestrischen Planeten

Wie in Abschnitt 1.3 beschrieben, ist die dynamische Reproduktion des Sonnensystems aus einer Scheibe von Planetesimalen und Protoplaneten schon relativ weit fortgeschritten<sup>10</sup>. Insbesondere die Arbeiten von Bond et al. (2010a) & Elser et al. (2012) haben untersucht, wie sich diese dynamischen Ergebnisse auf die Zusammensetzung der inneren Planeten auswirken. Die Autoren von Bond et al. (2010a) gehen dabei von einer chemischen Verteilung entsprechend den Gleichgewichtsbedingungen zu Beginn der Planetenentstehung aus. Die Ergebnisse entsprechen relativ gut den durchschnittlichen Werten der Elementenverteilung der inneren Planeten. Es zeigt sich jedoch, dass große Variationen bei Änderung des Zeitpunktes des angenommenen Beginns der Planetenentstehung auftreten. Dies liegt an dem mit zunehmendem Scheibenalter und abnehmender Temperatur höheren Anteil volatiler Substanzen, die im festen Zustand vorliegen. Auch zeigen die Autoren, dass in ihrem Modell kein Wasserbeitrag aus volatilere Regionen nach der LVAP nötig ist, um den aktuellen Wassergehalt der inneren Planeten korrekt wiederzugeben. Dies gilt allerdings nicht für die Elemente  $N$  und  $C$ , welche nur in den äußeren Regionen des Solaren Nebels als feste Stoffe vorhanden sind, und ohne späte Transportvorgänge in allen terrestrischen Planeten unterrepräsentiert wären.

Dass die Vorgehensweise von Bond et al. (ebd.) viele freie Parameter in Bezug auf die Scheibenparameter beinhaltet, kann auch in einer weiteren Studie gesehen werden, in der die Autoren die o.g. Methode auf bekannte, extrasolare Planetensysteme anwenden und erhebliche Varianz in der möglichen Zusammensetzung der Planeten erhalten (Bond et al., 2010b). Sie liefert somit keinen klaren Hinweis auf die tatsächliche Beschaffenheit der Planeten, die sich auch mittels Fernerkundung nicht bestimmen lässt. Die genannte Studie wurde noch erweitert durch die Arbeit von (Elser et al., 2012), welche die Auswirkungen verschiedener Scheibenmodelle auf die Resultate von (Bond et al., 2010a,b) untersucht. Die Arbeit kommt zu dem Ergebnis, dass die Art des Scheibenmodells signifikante Auswirkungen auf die Komposition der Planeten hat. Eine möglichst gute Bestimmung der Scheibenparameter ist also unumgänglich um realistische Ergebnisse

---

<sup>10</sup>Falls die Position und Größe der Riesenplaneten postuliert wird.

zu erhalten. Der Hauptteil der Materie, aus der die inneren Planeten bestehen, setzt sich aus Material zusammen, das der Region  $1 \text{ AU} < r < 4 \text{ AU}$  entstammt. Die Quellregion für die Planetenentstehung ist dabei individuell sehr unterschiedlich, da es sich um einen stochastischen Prozess handelt. Beide genannten Studien verwenden Gleichgewichtschemie um die Anfangskonzentrationen der Planetesimale zu bestimmen. Dieser Ansatz ist für refraktive Substanzen angemessen, führt aber bei flüchtigen Stoffen, deren Kondensationsradius starken Variationen unterliegt, zu großen Abweichungen. Auch ist besonders in den äußeren Zonen des Sonnensystems aufgrund der langen Zeitskalen  $\tau_{chem}$  nicht zu erwarten, dass sich das System im chemischen Gleichgewicht befindet, wie oftmals angenommen wird (Henning & Semenov, 2013; Visser et al., 2011) (siehe Diskussion in Abschnitt 2.1.1).

## 1.6. Motivation und Aufbau dieser Studie

Im Abschnitt 1.5 wurden verschiedene Untersuchungen mit dem Ziel der Beschreibung der chemischen Entwicklung des Solaren Nebels und insbesondere der Scheibenphase vorgestellt. Von vielen Autoren dieser Studien wurde erkannt, dass die Initialisierung der Scheibe eine wichtige Fragestellung ist (Elser et al., 2012; Visser et al., 2009, 2011) und sich nur konsistent durch Betrachtung der jeweiligen Vorphase des SN behandeln lässt. Wegen der genannten Schwierigkeiten einen geeigneten Übergangspunkt zwischen den einzelnen Zuständen des SN zu finden, müssen gewisse Vereinfachungen getroffen werden. Die unterschiedlichen Ansätze für dieses Anfangswertproblem sind unter anderem:

- Atomare Anfangsbedingungen werden gewählt unter der Annahme, dass  $\tau_{chem}$  hinreichend klein ist und so keine Auswirkungen auf die chemische Zusammensetzung hat (z.B. (Du & Bergin, 2014; Walsh et al., 2010))
- Annahme von Gleichgewichtschemie zur Ermittlung der Anfangsbedingungen (z.B. (Elser et al., 2012))
- Verwendung eines vorgeschalteten 0D Dunkelwolkenmodells zur Initialisierung der anschließenden Scheibenphase (z.B. (Albertsson et al., 2014; Dodson-Robinson et al., 2009; Visser et al., 2011; Walsh et al., 2012; Willacy & Woods, 2009; Yang et al., 2013)).
- Einordnung des Aggregatzustands der Spezies in Gas- oder Eisphase abhängig von den lokalen Umgebungsbedingungen (z.B. Heinzeller et al., 2011)
- Entwicklung der chemischen Zusammensetzung innerhalb eines vorgeschalteten Kollapsmodells und Initialisierung der gesamten Scheibe mit den Werten an der Stelle  $r = 60 \text{ AU}$  (Furuya et al., 2013)

- Kombination von Wolken-, Kollaps- und Scheibenmodell für spezifische Pfade (Aikawa & Herbst, 1999)

Unter den genannten Methoden ist sicher die atomare Initialisierung der einfachste Ansatz. Die Wahl der atomaren Häufigkeiten ist dabei immer eine Kombination von Modell und Beobachtungen. Bei einem solchen Vorgehen kann sich teilweise selbst bei Zeitskalen  $\geq 10^8$  a unter Umständen kein chemisches Gleichgewicht einstellen (Du & Bergin, 2014). Aber auch allen anderen Ansätzen ist gemein, dass sie naturgemäß nicht die Komplexität der früheren SN Stadien abbilden können. Um die Unsicherheiten in Bezug auf die Initialisierung abzubauen bzw. den Einfluss der Historie auf die chemische Entwicklung erstmals abschätzen zu können, wurde in der vorliegenden Arbeit ein Ansatz zur kontinuierlichen Beschreibung des SN mit Hilfe dreier gekoppelter Modelle gewählt, deren Endzustand jeweils das nächste Modell bestmöglich initialisiert (ähnlich Aikawa & Herbst (1999)). Es wird angestrebt möglichst vollständige raum- zeitliche Profile der Konzentration relevanter Spezies zu erhalten. Die einzelnen Modelle zur Beschreibung der Phasen des SN sind in Kapitel 2 erklärt. Ihre Ergebnisse sind in Kapitel 3 dargestellt, bzw. werden in 4 diskutiert.

Die hier gewählte Methode ist dabei sowohl geeignet die o.g. Ansätze für das Anfangswertproblem zu verifizieren als auch neue Ansatzvarianten aufzuzeigen. Da es sich von der Konzeption her um ein Ab- initio Modell handelt, weist es weniger freie Parameter auf als solche Ansätze, die nur Ausschnitte der Entwicklung des SN betrachten. Natürlich ist eine genaue Anpassung der Parameter an experimentelle Daten dafür um so wichtiger.





## 2. Modelle und Theorie

In diesem Kapitel soll ein Überblick über die Theorie gegeben werden, die Voraussetzung für die mathematische Behandlung der chemischen Vorgänge im Solaren Nebel ist. In Abschnitt 2.1 sind die grundlegenden chemischen Reaktionen und deren Abhängigkeit von den vorherrschenden Zustandsgrößen und Strahlungsparametern zusammengefasst. Ziel ist es, den nötigen Satz an Eingangsparametern zu finden, der eine realistische Beschreibung des Solaren Nebels möglich macht. Darauf aufbauend werden in den Abschnitten 2.2 bis 2.4 die physikalischen Modelle besprochen, die den Hintergrund für die zeitliche Entwicklung der chemischen Zusammensetzung der jeweiligen SN Phase bilden, und die benötigten Parameter für das in dieser Arbeit verwendete Chemiemodell liefern.

### 2.1. Chemische Prozesse in kosmischen Umgebungen

Zum Zeitpunkt des Erscheinens dieser Arbeit waren circa 180 Moleküle im interstellaren Medium und in Sternenhüllen bekannt, davon sogar ca. 56 außerhalb unserer Galaxie (Müller et al., 2005). Sie setzen sich meist aus nur wenigen Atomen zusammen, doch auch von langkettigen Kohlenstoffverbindungen ist schon berichtet worden (ebd.). Da auch sogenannte Präbiotische Moleküle<sup>1</sup> gefunden worden sind, stellt sich natürlich die Frage, unter welchen Bedingungen sich diese zu komplexeren organischen Verbindungen zusammentun können, und ob dies auch an anderen Orten als auf der Erde, wie z.B. auf extrasolaren Planeten, möglich ist.

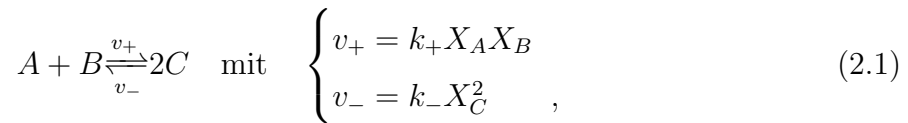
Die klassische Chemie untersucht die Bedingungen, unter denen Atome ihre Bindungen untereinander ändern und dabei neue Moleküle bilden. Die dafür zuständigen Prozesse laufen auf einer Größenskala von  $10^{-10} - 10^{-6}m$  ab, wobei Energie zwischen  $0.1 - 50eV$  umgesetzt wird. Im Gegensatz dazu sind die Bedingungen im astrochemischen Kontext oft viel extremer. In Abbildung 1.3 sind die physikalischen Bedingungen gegeben, wie sie in kosmischen Umgebungen, hier den verschiedenen Stadien des SN, vorherrschen. Hinzu kommt, dass die chemische Zusammensetzung (wie schon in Abschnitt 1.1 ange-

---

<sup>1</sup>Moleküle, die an den Prozessen, welche zur Entstehung von Leben geführt haben, beteiligt waren (Herbst & Dishoeck, 2009)

deutet) stark vom leichten Element  $H$  dominiert wird. Sollten molekulare Verbindungen in der jeweiligen Umgebung möglich sein, ist der meiste Kohlenstoff in  $CO$  gebunden. Der Sauerstoff liegt in gebundener Form in den Molekülen  $CO$  und  $H_2O$  vor. Stickstoff liegt meist molekular als  $N_2$  vor. Aufgrund der dünnen Umgebung sind Reaktionen mit drei Reaktionspartnern sehr unwahrscheinlich und demzufolge vernachlässigbar. Dies limitiert die möglichen Reaktionen beträchtlich, da somit Reaktionen ausgeschlossen sind, die nicht der Impulserhaltung genügen. Um die chemische Entwicklung in den Stadien des SN zu modellieren, ist die genaue Bestimmung der Reaktionsraten nötig. Die in kosmischen Regionen vorherrschenden Reaktionsbedingungen stellen jedoch hohe Ansprüche an deren experimentelle Realisierung. Wegen der langen Zeitskalen<sup>2</sup> und den heutzutage noch nicht realisierbaren Ultrahochvakuumbedingungen, besteht meist lediglich die Möglichkeit, die aus Experimenten gewonnenen Momentaufnahmen auf die Langzeitentwicklung zu extrapolieren. Dabei wird die Annahme getroffen, dass sowohl die Depositionszeit als auch die Relaxationszeit bezüglich der Lebensdauer des Zustandes zu vernachlässigen ist. Gerade letztere Annahme stellt aber eine starke Vereinfachung dar. Hinzu kommt, dass sich durch die Extrapolation aus kleinen Abweichungen in den experimentell ermittelten Raten auf lange Zeit große Abweichungen in den chemischen Konzentrationen ergeben können. Die einzige Möglichkeit ein konsistentes Bild zu erhalten, besteht in der Kombination von Observationen, Laborexperimenten, theoretischer Chemie und astrochemischer Modellierung.

Eine in diesem Zusammenhang wichtige Kontrollgröße ergibt sich aus dem Vergleich der Gleichgewichtszeitskala  $\tau_{eq}$ , in der ein chemisches System in den Gleichgewichtszustand übergeht, und der Lebensdauer  $\tau_{lifetime}$  des Zustandes, in dem sich das System befindet. Ist eine allgemeine Reaktionsgleichung gegeben, wie:



so findet in diesem Fall eine Umwandlung der Stoffe  $A$  und  $B$  in den Stoff  $C$  sowie dessen Rückreaktion statt. Der Anteil an  $A, B$  ändert sich also gegenüber  $C$  mit der Reaktionsrate  $v_{+/-}$ . Die Reaktionsrate ist dabei neben den Konzentrationen  $X$  der Spezies auch vom Ratenkoeffizient  $k_{+/-}$  abhängig. Ist die Lebensdauer des Zustandes lang genug, d.h gilt  $\tau_{lifetime} \gg \tau_{eq}$ , wird das System in einen Gleichgewichtszustand übergehen. Die Stoffe werden zwar immernoch ineinander umgewandelt, jedoch bleiben ihre relativen Anteile konstant. In diesem Fall haben Hin- und Rückreaktion dieselbe Reaktionsrate  $v_+ = v_-$ . Ändert sich der Zustand des Systems allerdings schnell ( $\tau_{lifetime} < \tau_{eq}$ ), kann

<sup>2</sup>Der geringe Wirkungsquerschnitt führt bei  $T = 10K$  und  $n = 10^4 cm^{-3}$  zu einer durchschnittlichen Rate von lediglich 1 Kollision pro Monat.

sich das System auf diesen Zustand nicht einstellen, sodass sich die relativen Anteile von  $A, B, C$  beständig ändern ( $v_+ \neq v_-$ ). In einem solchen Nichtgleichgewichtszustand befinden sich große Teile des Solaren Nebels (Henning & Semenov, 2013). Eine mathematische Behandlung muss diesem Umstand also Rechnung tragen, indem sie versucht, die Ratenkoeffizienten  $k_{+/-}$  möglichst genau zu bestimmen, um auch für den Fall des Nichtgleichgewichts eine konsistente Beschreibung zu gewährleisten. Da  $k_{+/-}$ <sup>3</sup> von vielen physikalischen Größen abhängen können, müssen diese vom zugrundeliegenden physikalischen Modell, mit dem die Zustandsgrößen im SN ermittelt werden, möglichst genau geliefert werden.

### 2.1.1. Mathematische Modelle zur Beschreibung der chemischen Kinetik

Im Allgemeinen wird versucht die Chemie im Rahmen von Ratengleichungen zu behandeln, welche im thermodynamischen Grenzfall aus der Mastergleichung für die Wahrscheinlichkeitsverteilung der chemischen Häufigkeiten hervorgehen (Kupper, 2014). Diese Näherung vernachlässigt zum Einen statistische Schwankungen in den eigentlich stochastischen Umwandlungsprozessen, und überführt zum Anderen die Gleichungen von einer diskreten in eine kontinuierliche deterministische Betrachtung (Gillespie, 2007).

Entsprechende Reaktionsnetzwerke haben sich inzwischen etabliert und sind gut untersucht (siehe Wakelam et al. (2010) für einen Überblick). Dadurch beschränkt sich die chemische Simulation auf die Lösung des gewöhnlichen Differentialgleichungssystems erster Ordnung:

$$\frac{d}{dt}X_i = \sum_{j=1}^N k_{ij}X_i \quad (2.2)$$

$X_i$  bezeichnet hier den Konzentrationsvektor der chemischen Spezies  $i$  mit  $i \in [1, \dots, N]$  und  $k_{ij}$  die Koeffizientenmatrix des Reaktionsnetzwerks mit  $j \in [1, \dots, M]$  und  $M$  der Anzahl an Reaktionen.  $X_i$  wird in diesem Kontext als der Quotient der Teilchenzahl zur Gesamtteilchenzahl  $N_i/N_{tot}$ <sup>4</sup> verstanden. Dieses Gleichungssystem ist nichtlinear, wie man am Beispiel der Reaktion in Gleichung 2.1 sieht, in der  $v_-$  quadratisch von der Konzentration  $X_C$  abhängt (bzw.  $v_+$  vom Produkt  $X_A X_B$ ), und - wegen der verschiedenen involvierten Zeitskalen (siehe Abschnitt 2.1.1) - weiterhin höchst steif (Hairer, 1996). Die Lösung über lange Zeitabschnitte erfordert daher den Einsatz

<sup>3</sup>Es ist zu beachten, dass der Ratenkoeffizient  $k$  je nach der Ordnung der zugrundeliegenden chemischen Reaktion unterschiedliche Einheiten besitzen kann.

<sup>4</sup>bzw. als das Verhältnis der Stoffdichte zur Gesamtdichte  $\rho_i/\rho_{tot}$ . Für Teilchen ungefähr gleicher Masse sind diese Werte identisch.

adaptiver Lösungsverfahren. In dieser Arbeit wurde dafür das externe Softwarepaket DVODEPK verwendet (Brown et al., 1989; Brown & Hindmarsh, 1989). Es nutzt die schwache Besetzung der Koeffizientenmatrix  $k_{ij}$  aus, um sie vor dem Lösen durch entsprechende Methoden zu präkonditionieren und das Gleichungssystem anschließend iterativ zu lösen.

Wie bereits erwähnt, ist die experimentelle Bestimmung der Reaktionskoeffizienten jedoch keineswegs trivial und meist fehlerbehaftet. Zusätzlich stellt der Ratenansatz selbst eine Näherung dar. Die Auswirkungen sind je nach Umgebungsbedingungen unterschiedlich gravierend und können bei einzelnen Spezies zu Abweichungen in der finalen Konzentration von über 40% führen (Vasyunin et al., 2008; Wakelam et al., 2006, 2005). Die Unsicherheiten aus astronomischen Beobachtungen liegen allerdings in derselben Größenordnung und erlauben so leider keine genauere Bestimmung.

Das in dieser Arbeit verwendete Modell für die chemische Kinetik ist analog zu dem in Kupper (2014) dargestellten. Die Gasreaktionen basieren dabei auf den etablierten Datenbanken OSU + UMIST und die Staubreaktionen auf dem ALCHEMIC Programm von Semenov & Wiebe (2011). Für eine umfassende Diskussion und Implementierungsdetails wird auf die entsprechenden Publikationen verwiesen. Im Rahmen der Studie von Kupper (2014) wurden die in der Datenbank enthaltenen Reaktionen um die Behandlung der Isotope von Wasserstoff und Stickstoff erweitert. Dadurch umfasst die Datenbank in ihrer aktuellen Ausbaustufe mittlerweile  $N \approx 1900$  Spezies und ca. 17.330 Reaktionen. Bei einem nichtlinearen Differentialgleichungssystem dieser Größe mit vielen, möglicherweise ungenau bestimmten Konstanten, kann die Existenz von Attraktoren und Hysterese nicht ausgeschlossen werden<sup>5</sup>. Insbesondere sind aus dem Forschungsgebiet der Nichtlinearen Dynamik einfache chemische Reaktionen bekannt, die trotz der ebenfalls deterministischen Natur ihrer beschreibenden Gleichungen Formen von Chaos zeigen können. Selbiges kann wegen der Größe des Parameterraumes auch hier nicht grundsätzlich ausgeschlossen werden. Um keinen zusätzlichen Fehler einzuführen, ist es für die Behandlung dieses Anfangswertproblems von entscheidender Bedeutung, die Anfangsbedingungen des Gleichungssystems möglichst genau zu treffen, da ein Differentialgleichungssystem abhängig von den Anfangsbedingungen im Allgemeinen beliebig viele Lösungen besitzen kann. Ist dies nicht der Fall, kann selbst bei der Wahl richtiger Reaktionsparameter nicht garantiert werden, dass das System die richtige Lösung ergibt. Diese Anforderung bedeutet anschaulich, dass sich die Anfangsbedingung bereits “nahe”<sup>6</sup> der exakten Lösung des jeweiligen Zustands befinden

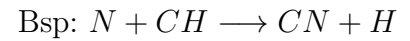
<sup>5</sup>Gewisse Formen von nichtlinearen Zusammenhängen, wie Bistabilitäten in den Häufigkeitsverteilungen der Spezies, wurden für kalte Kerne bestätigt (Lee et al., 1998).

<sup>6</sup>im topologischen Raum der Lösungen des DGL Systems unter Annahme eines passenden Abstandsbegriffs (Metrik)

sollte. Hier zeigt sich der Kernpunkt des Ansatzes zur kontinuierlichen Beschreibung des Solaren Nebels. Bei den Übergängen zwischen den Modellen müssen “Prellungen” des DGL Systems unbedingt vermieden werden, da es sonst genau wie bei den in Abschnitt 1.6 beschriebenen ad hoc gewählten Anfangsbedingungen des Solaren Nebels zu unrealistischen Lösungen kommen kann.

Im Folgenden werden einige wichtige Reaktionstypen genannt, die im astrochemischen Kontext auftreten und für die vorliegende Arbeit eine Rolle spielen. Außerdem werden die Grundlagen zur Bestimmung der jeweils zugehörigen Ratenkoeffizienten besprochen, welche der Datenbank OSU (Wakelam et al., 2010) entstammen.

### Neutral-Neutral Reaktionen

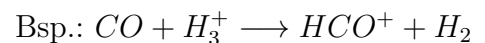


Dieser Mechanismus beschreibt das zufällige Kollidieren zweier Reaktionspartner unter thermischen Geschwindigkeiten. Da der Vorgang rein kinetisch ist, und keiner der Partner eine durch das Fehlen von Ladungsträgern induzierte, erhöhte Reaktionsaffinität aufweist, muss meist eine signifikante Aktivierungsenergie aufgebracht werden um die Reaktion zu ermöglichen. Die meisten Reaktionen dieses Typs werden nach dem Gesetz von Arrhenius parametrisiert:

$$k_{neu-neu} = A(T) \exp \left\{ -\frac{E_a}{k_B T} \right\} \quad (2.3)$$

Dabei ist  $A(T)$  ein von Reaktion und Temperatur abhängiger Modellierungsfaktor,  $E_a$  die Aktivierungsenergie und  $k_B$  die Boltzmann Konstante. In astrochemischen Datenbanken wird  $A(T)$  meist durch zwei Konstanten  $\alpha, \beta$  zu  $A(T) = \alpha(T/300)^\beta$  parametrisiert und zusammen mit  $\gamma = E_a$  angegeben. Typische Ratenkoeffizienten bei 10 K sind mit  $k_{neu-neu} < 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$  sehr gering (ebd.). Einige Reaktionen bestimmter Spezies bilden davon jedoch eine Ausnahme. Sie sind auch bei 10 K noch effizient, besonders falls einer der Reaktionspartner ungesättigt ist, wie z.B. bei Reaktionen vom Typ  $C + C_n H_m \rightarrow C_{n+1} H_{m-1} + H$  mit atomarem Kohlenstoff im Grundzustand (Chastaing et al., 1999). Dieser Reaktionstyp ist möglicherweise für die Entstehung von langkettigen Kohlenstoffverbindungen bedeutsam.

### Ion-Neutral Reaktionen



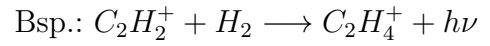
In kalten Gasen läuft die Mehrzahl der Reaktionen unter Beteiligung von Ionen ab. Die

langreichweitige Wechselwirkung durch das induzierte Dipolmoment und eine geringe Aktivierungsenergie machen diesen Reaktionstypus sehr effizient bei niedrigen Temperaturen  $T < 50$  K. Meist folgen sie der auf Langevin zurückgehenden, einfachen Vorschrift (Herbst, 2001):

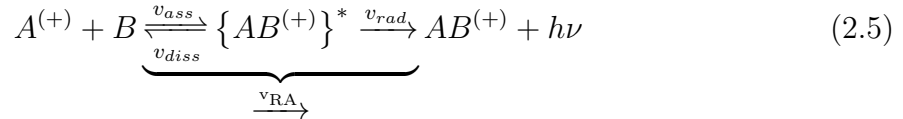
$$k_{ion-mol} = 2\pi e \sqrt{\frac{\alpha}{\mu}} \quad (2.4)$$

Dabei ist  $e$  die Elektronenladung,  $\alpha$  die Polarisierbarkeit und  $\mu$  die reduzierte Masse der Reaktanten. Typische Ratenkoeffizienten sind  $10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$  für endotherme und bis  $10^{-7} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$  für exotherme Reaktionen (ebd.). Bei einem Vergleich mit Neutral-Neutral Reaktionen unter Annahme von Dunkelwolkenbedingungen, weisen die Ion-Neutral Reaktionen eine um den Faktor Tausend höhere Reaktionsrate auf.

### Radiative Assoziation



Radiative Assoziation beschreibt den Vorgang, bei dem zwei Spezies zu einem molekularen Produkt kombinieren, wobei die aus dem Stoß überschüssige Energie bei einem der Reaktionspartner als Anregung verbleibt. Diese muss zeitversetzt durch spontane Emission abgestrahlt werden, falls das Molekül sich stabilisieren soll. Andernfalls zerfällt es durch die Rückreaktion wieder in seine Bestandteile:



Dieser Mechanismus ist dabei weitgehend unabhängig vom Ladungszustand der Reaktanten. Dies soll durch das hochgestellte (+) symbolisiert werden, während das \* Symbol auf das Vorhandensein signifikanter innerer Energie hinweist.  $k_{diss}$  hängt stark von der inneren Energie und Art des Moleküls ab. Große Moleküle mit Teilchenzahlen  $N \gtrsim 10$  können im Allgemeinen innere Energie leichter auf vorhandene (Schwingungs-) Freiheitsgrade verteilen, wodurch die Wahrscheinlichkeit der Rückreaktion reduziert wird. Dies gilt nicht für kleine Spezies, für die die radiative Assoziation ein sehr ineffektiver Prozess ist. Für sie lässt sich der Ratenkoeffizient des Gesamtprozesses durch die Annahme  $k_{diss} \gg k_{rad}$  vereinfachen:

$$k_{RA} = k_{ass} \left\{ \frac{k_{rad}}{k_{rad} + k_{diss}} \right\} \stackrel{N \lesssim 10}{\approx} k_{rad} \frac{k_{ass}}{k_{diss}} \quad (2.6)$$

Der Ratenkoeffizient für die Stabilisierung durch Emission  $k_{rad}$  hängt von den Zustandsdichten  $\rho_s$  der  $s$  Oszillatoren bei der Energie  $E$  beziehungsweise  $\rho_{s-1}$  bei  $E - n_i h\nu_i$  ab

(Wakelam et al., 2010):

$$k_{rad} = \frac{1}{\rho_s(E)} \sum_{i=1}^{modes} A_{i,1,0} \sum_{n_i=1}^{n_{max}} n_i \rho_{s-1} (E - n_i h \nu_i) \quad (2.7)$$

Dabei ist die Energie  $n_i h \nu_i$  im  $i$ -ten Oszillator gespeichert.  $A_{i,1,0}$  ist der Einsteinkoeffizient für den spontanen Übergang von Zustand  $n_i = 1$  zu  $n_i = 0$ . Typische Reaktionskoeffizienten für  $k_{rad}$  liegen zwischen  $10 - 1000 \text{ s}^{-1}$ , sodass dieser Prozess sehr effizient ist. Aufgrund der für kleine Moleküle hohen Wahrscheinlichkeit der Redissoziation ist die radiative Assoziation vor allem für große Moleküle wichtig. Gerade die Emissionen aus den nach der Reaktion angeregten Zuständen sind für die Entdeckung vieler komplexer chemischer Verbindungen verantwortlich (Herbst & Dishoeck, 2009).

### Dissoziation und Ionisation durch kosmische Strahlung

Unter kosmischer Strahlung werden ionisierte Partikel (Protonen,  $\alpha$ -Teilchen und Elektronen) verstanden, die eine hohe kinetische Energie und damit ein hohes Ionisierungs- und Dissoziationspotential besitzen. Als Strahlungsquelle werden je nach kinetischer Energie Sonnenwinde, Supernovas oder AGN angenommen (Ackermann et al., 2013). Die beobachteten Strahlungsraten verschiedener Regionen variieren stark untereinander. Für Simulationen wird meist eine konstante Rate  $\zeta_{CRP}$  zwischen  $10^{-15} \text{ s}^{-1}$  pro  $H_2$  Molekül (im ISM) (Shaw et al., 2008) und  $10^{-18} \text{ s}^{-1}$  pro  $H_2$  Molekül (für Wolkenkerne) (Caselli et al., 1998) angenommen. Der zugehörige Ratenkoeffizient errechnet sich dann aus dem (Pseudo-) Wirkungsquerschnitt des Stoffes  $\chi_{CRP}$  zu:

$$k_{CRP} = \chi_{CRP} \zeta_{CRP} \quad (2.8)$$

Es wird angenommen, dass kosmische Strahlung Material mit einer Zelendichte von bis zu  $\Sigma_{CRP} \lesssim 96 \text{ g cm}^{-2}$  durchdringen kann (Umebayashi & Nakano, 1981), womit sie praktisch im gesamten Solaren Nebel wirksam wäre. In der Scheibenphase könnte ihre Wirkung allerdings durch den dann einsetzenden Sonnenwind um mehrere Größenordnungen auf  $\zeta_{CRP} \lesssim 10^{-20} \text{ s}^{-1}$  reduziert werden (Cleeves et al., 2013). Die kosmische Strahlung stellt durch ihre ionisierende Wirkung einen Großteil der freien Ladungsträger in Dunkelwolken zur Verfügung, und ermöglicht so auch in diesen kalten Zonen eine reiche Chemie.

### Ionisation durch Radionukleide

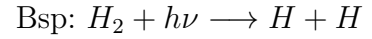
Im solaren Nebel finden sich auch Anteile radioaktiver Substanzen, die über ihre Zerfallsprozesse Einfluss auf die Chemie im Nebel haben können. Die durch sie hervor-

gerufene Ionisierungsrate hängt von der Häufigkeit  $X$  der radioaktiven Spezies, ihrer Halbwertszeit und der durchschnittlichen kinetischen Energie ihrer Zerfallsprodukte ab. Da ihre Eindringtiefe sehr gering ist, kann man in guter Näherung annehmen, dass die ionisierende Strahlung nur lokal auftritt. (Umebayashi & Nakano, 2009) Von den radioaktiven Elementen mit langer Halbwertszeit ( $> 10^8$  Jahre), wie  $^{40}\text{K}$ ,  $^{87}\text{Rb}$ ,  $^{238}\text{U}$ , erreicht keines eine Ionisierungsrate  $> 10^{-22}\text{s}^{-1}$ . Leichte Elemente, wie  $^{26}\text{Al}$ ,  $^{36}\text{Cl}$ ,  $^{60}\text{Fe}$  mit kurzer Halbwertszeit ( $< 10^8$  Jahre), können jedoch Raten von  $\approx 10^{-19} - 10^{-20}\text{s}^{-1}$  erreichen. Kumulativ kann die ionisierende Wirkung aller Radionukleide auf

$$\zeta_{RN} \approx 7.6 - 11 \times 10^{-19}\text{s}^{-1} \quad (2.9)$$

abgeschätzt (ebd.) und entsprechen Gleichung 2.8 in eine Reaktionsrate umgerechnet werden. Wegen der hohen Kondensationstemperatur beinahe all dieser Stoffe ist deren Anteil besonders hoch in Gegenden, in denen die Staubkonzentration ebenfalls hoch ist. Da mit dem Beginn der Scheibenphase auch die Staubsedimentation einsetzt, kann es hier zu Staubanreicherungen im Bereich der Mittelebene kommen.

## Photodissoziation und Ionisation



Hochenergetische Photonen sind in der Lage chemische Bindungen zu lösen. Insbesondere UV- und Röntgenstrahlung tritt in allen Phasen des Solaren Nebels an dessen Grenzen zum ISM auf, da dort wegen der geringen Abschirmung große Anteile des ISFR absorbiert werden. Aber auch im Inneren des SN werden durch die Interaktion von CRP Strahlung mit Wasserstoff hochenergetische Photonen erzeugt. Im Verhältnis zur CRP Strahlung ist ihre Eindringtiefe, gemessen in der Zeilendichte  $\Sigma_g$ , die durchdrungen werden kann, jedoch gering:

- Röntgenstrahlung:  
1 keV;  $\Sigma_g \approx 0.5\text{gcm}^{-2}$
- Ferne Ultraviolette Strahlung (FUV):  
6–13 eV;  $\Sigma_g \approx 10^{-3}\text{gcm}^{-2}$

Um die Interaktion der Strahlung mit einem Molekül vorherzusagen, muss dessen wellenlängenabhängiger Wirkungsquerschnitt  $\chi(\lambda)$  betrachtet werden. Falls dieser bekannt ist, kann die Photodissoziationsrate durch die Multiplikation mit der Intensität des vorhanden Strahlungsfelds  $I(\lambda)$  ermittelt werden (Dishoeck et al., 2006). Im Falle der Kontinuumsabsorption gilt:

$$k_{pd}^{cont} = \int \chi(\lambda) I(\lambda) d\lambda \text{s}^{-1} \quad (2.10)$$



Der Wirkungsquerschnitt  $\chi$  ist dabei meistens eine flache Funktion mit einigen Ausschlägen bei speziellen Resonanzfrequenzen. Da insbesondere der Staub UV-Photonen effektiv streuen oder absorbieren kann, muss natürlich die Abschwächung der Strahlung durch die zwischenliegende Materie beachtet werden.

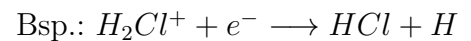
Dies ist vor allem für Spezies wie  $H_2$  und  $CO$  von Bedeutung, deren Anregung auf speziellen Absorptionslinien erfolgt, und die sich ansonsten weitgehend inert verhalten. Für den Fall der Linienabsorption berechnet sich die Rate nach (ebd.):

$$k_{pd}^{line} = \frac{\pi e^2}{mc^2} \lambda_u^2 f_u \eta_u I_u s^{-1} \quad (2.11)$$

Dabei bezeichnet  $\eta$  die Dissoziationseffizienz des Zustandes  $u$ , während  $f$  die Oszillationsstärke vom Grundzustand aus beschreibt. Für die Abschirmung durch Materie im Falle der Linienanregung bedeutet dies, dass es zu Phänomen der Selbstabschirmung kommt. Der Grad der Abschirmung hängt dabei insbesondere davon ab, wieviel auf derselben Wellenlänge absorbierendes Material, also u.a. der Stoff selbst, zwischen dem Strahler und der Quelle liegt. Da mit Molekülen  $H_2$  und  $CO_2$  auch Spezies betroffen sind, die zu den häufigsten vorkommenden Molekülen zählen, kann dieser Effekt durchaus Auswirkungen auf die Struktur des Nebels haben.

Am wichtigsten wird diese Reaktionsart jedoch mit dem Eintritt in die späte Scheibenphase, da die jungen Sterne starke UV- und Röntgenstrahlung aussenden, die im Vergleich zum ISRF zu einer um Größenordnungen höheren Bestrahlung der ausgesetzten Bereiche führen (Dishoeck et al., 2006; Fogel et al., 2011; Herbig & Goodrich, 1986).

### Dissoziative Rekombination



Ein einfach positiv geladenes Molekül wird durch Rekombination mit einem Elektron neutral, die dadurch frei werdende Energie spaltet das Molekül jedoch auf.

Typische Ratenkoeffizienten bei 300 K sind hierfür  $10^{-7}$  bis  $4 \times 10^{-6} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$  (Wakelam et al., 2010). Da keine Energiebarriere existiert, ist dieser Prozess nur schwach von der Temperatur abhängig ( $k \sim T^{-1/2}$ ), wobei sich allerdings auch viele Ausnahmen mit noch stärkerer Effizienz bei niedrigen Temperaturen finden lassen.

### Einbeziehung der katalytischen Wirkung des Staubes

Der Staub hat eine große Bedeutung für die Astrochemie. Er kann als Katalysator, Reaktionspartner- Reservoir und Energie- Senke zur Aufnahme von kinetischer Energie

und Ladung fungieren, und so Reaktionen ermöglichen, die in der Gasphase unmöglich bzw. sehr unwahrscheinlich wären. Die Adsorption geschieht dabei über schwache Van-der-Waals- Kräfte (Physisorption) oder Valenzkräfte (Chemisorption). Die Adsorptionsrate kann dabei wie folgt bestimmt werden (Semenov, 2005):

$$k_{ad} = S \sigma v_{th} n_d \quad (2.12)$$

Dabei ist  $\sigma$  die mittlere Oberfläche des Staubes,  $S$  der (normalerweise) als konstant angenommene “Sticking” Koeffizient,  $v_{th}$  die thermische Geschwindigkeit und  $n_d$  die Teilchenzahldichte des Staubes. Sind die Reaktanten auf dem Staub adsorbiert, können sie über drei mögliche Prozesse auf seiner Oberfläche wandern bzw. einen Reaktionspartner finden (Herbst & Dishoeck, 2009):

- Diffusive Bewegung (Langmuir-Hinshelwood):  
Reaktanten tunneln oder hüpfen thermal von einer Bindungszone des Staubes zur nächsten, bis ein Reaktionspartner gefunden ist oder sie desorbieren.
- Eley-Rideal Mechanismus:  
Ein gasförmiger Stoff reagiert direkt mit einem adsorbierten.
- “Hot-Atom” Mechanismus:  
Ein gasförmiger Stoff adsorbiert auf die Stauboberfläche, ohne jedoch eine Bindungszone zu betreten, und reagiert von dort mit anderen adsorbierten Spezies.

Von den drei erwähnten Mechanismen lässt sich nur die diffusive Bewegung in den Ratenansatz integrieren. Die anderen erfordern eine voll stochastische Beschreibung. Eine solche ist für die eisigen Oberflächen des Staubes zwar bekannt (Cuppen & Herbst, 2007), kann allerdings wegen des hohen numerischen Aufwandes und der Schwierigkeit sie mit dem deterministischen Ratenansatz zu kombinieren, noch nicht über lange Zeitskalen erfolgen (ebd.). Hinzu kommt, dass sich die Ergebnisse einer stochastischen Beschreibung nur grundlegend von dem Ratenansatz unterscheiden, falls die Tunnelwahrscheinlichkeit sehr hoch ist - was noch nicht abschließend geklärt ist (Herbst & Dishoeck, 2009). Es zeigt sich weiterhin, dass sich die experimentell gewonnen Ergebnisse in Bezug auf die ermittelten Stoffkonzentrationen gut mithilfe des Langmuir-Hinshelwood-Mechanismus beschreiben lassen (Katz et al., 1999).

Die Reaktionen auf der Oberfläche des Staubes sind von elementarer Bedeutung für die Produktion von molekularem Wasserstoff ( $H_2$ ) und von Wassereis ( $H_2O$ ) (ebd.). Die Stoffe verbleiben zunächst als Eisspezies auf dem Staubkorn, wo sie sich in Schichten anlagern können.

Sie können das Korn über thermische Desorption (Verdampfung), Photodesorption oder bei einer kurzfristigen, CRP induzierten Aufheizung des Kornes verlassen (Semenov,

2005). Die zugehörigen Ratenkoeffizienten berechnen sich über:

$$k_{th}(T_d) = \omega_{vib} \exp(-T_{des}/T_d) \quad (2.13)$$

$$k_{ph}(T_d) = [I_{IS} \exp(-2A_v^{IS}) + I_S \exp(-2A_v^S)] Y(T_d) \pi s^2 \quad (2.14)$$

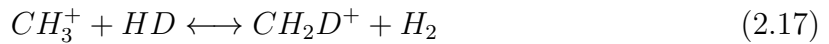
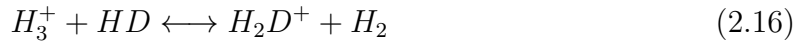
$$k_{CRP}(T_d) \sim \omega_{vib} \exp(-T_{des}/T_{CRP}(T_d)) \quad (2.15)$$

Dabei bezeichnet  $\omega_{vib}$  die charakteristische Vibrationsfrequenz (Hasegawa et al., 1992) und  $T_{des}$  die Desorptionstemperatur der jeweiligen Spezies (Hasegawa & Herbst, 1993).  $T_{CRP}(T_d)$  ist die Spitzentemperatur des Staubes aufgrund der Aufheizung durch Absorption von CRP (Semenov, 2005),  $I_{IS}$  und  $I_S$  sind die Intensitäten des interstellaren bzw. stellaren Strahlungsfeldes mit den jeweiligen Abschirmungen  $A_v^{IS}$  bzw.  $A_v^S$ .  $Y(T_d)$  bezeichnet die Effizienz der Photodesorption bei der jeweiligen Staubtemperatur  $T_d$ . Durch die Abhängigkeit von den Eindringtiefen  $A_v^{IS}$  bzw.  $A_v^S$  werden die Ratenkoeffizienten  $k_{th}$  und  $k_{CRP}$  stark von der Abschirmung der Umgebung vor der jeweiligen Strahlung bestimmt (vergleiche Reaktionsbeschreibung zu “Photodissoziation und Ionisation” sowie “Dissoziation und Ionisation durch kosmische Strahlung”). Ein noch nicht explizit berücksichtigter Desorptionsmechanismus ist die Aufnahme eines Teils der bei exothermen Reaktionen freiwerdenden Energie, um die Bindung an die Stauboberfläche zu lösen. Er ist experimentell sehr schwer von der thermischen Desorption zu unterscheiden, und wird deshalb oft implizit in deren Raten berücksichtigt (ebd.).

Die Ratenkoeffizienten für alle genannten Staubprozesse, die im hier zugrundeliegenden Modell verwendet werden, basieren auf denen von Semenov & Wiebe (2011).

## Deuterium Fraktionierung

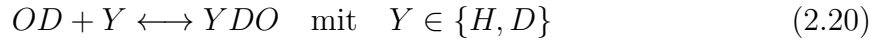
Die Fraktionierung des Deuteriums beruht auf den verschiedenen Nullpunktsenergien von deuterierten und nichtdeuterierten Molekülen (Henning & Semenov, 2013). Dies führt dazu, dass Rückreaktionen wie beispielsweise bei:



aufgrund einer Temperaturbarriere ineffektiv werden (Robert, 2006). Somit kommt es zur Anreicherung von  $H_2D^+$ , welches über Ion-Neutral Reaktionen bevorzugt das Deuterium in andere Moleküle überführt (Öberg et al., 2012; Roberts et al., 2003). Wie in Abschnitt 2.1.1 erwähnt, ist dieser Reaktionsmechanismus besonders bei tiefen Temperaturen  $T \leq 30K$  wichtig. Verstärkend kommt hinzu, dass konkurrierende Reaktionspfade über  $CO$ , die die  $H_3^+$  Isotope zerstören würden, bei so tiefen Temperaturen ausgefroren

sind. In wärmeren Umgebungen, wie heißen Kernen, wird die Anreicherung von Deuterium in den Spezies wieder abgebaut, so dass sich die Gleichgewichtsverteilung erneut einstellen kann (Caselli & Ceccarelli, 2012).

Das  $D/H$  Verhältnis steigt also in einigen Stoffen um ein Vielfaches über das atomare Verhältnis im Protosolaren Nebel (siehe Abbildung 1.5). Verschiedene Moleküle zeigen zum Teil sehr unterschiedliche Grade an Deuterierung. So ist  $H_2O$  in bekannten interstellaren Umgebungen im Allgemeinen weniger deuteriert, als beispielsweise dort gemessenes  $H_2CO$ ,  $CH_3OH$  oder  $H_2S$  (Taquet et al., 2013b). Die Deuterium Fraktionierung läuft für Wasser hauptsächlich über molekularen Sauerstoff  $O_2$  bzw. Ozon  $O_3$  über folgenden Mechanismus ab:



Da es in der vorliegenden Arbeit um die Historie der Wasserentstehung in den verschiedenen Stadien des SN geht, ist im Folgenden mit dem  $D/H$  Verhältnis immer dasjenige des Wassers, also  $(D/H)_{H_2O}$ , gemeint, falls es nicht explizit anders angegeben ist.

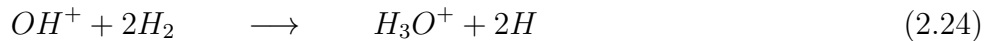
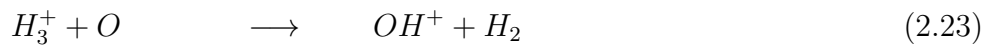
## Wasserentstehung

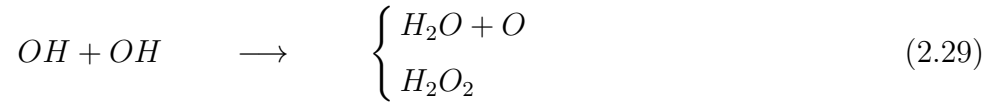
Die Entstehung von Wasser im Solaren Nebel läuft hauptsächlich über zwei verschiedene Prozesse ab (Kupper et al., 2012):

- Neutral-Neutral- Gasphasenreaktionen:



- Staub- Oberflächenreaktionen:





In der Gasphase laufen bei Temperaturen  $\gtrsim 200$  K hauptsächlich die oben beschriebenen Neutral-Neutral Reaktionen ab (Bergin & Dishoeck, 2012), während auf der Stauboberfläche Ionen- bzw. Rekombinationsreaktionen am wichtigsten für die Bildung von Wasser sind (Reaktionen 2.23 bis 2.25 (Larsson et al., 2012)). Darüber hinaus existieren noch andere Reaktionspfade, die abhängig von den Umgebungsparametern an Bedeutung gewinnen (Reaktionen 2.26 bis 2.29 (Taquet et al., 2013b)).

Nur im Falle der Staubreaktionen kommt es zu einer bedeutenden Deuterium Fraktionierung, weswegen Wasser aus kalten Regionen im Allgemeinen ein höheres  $D/H$  Verhältnis aufweist, als das in wärmeren Regionen entstandene (Cleeves et al., 2014; Robert, 2006). Alle oben genannten Reaktionen können auch in deuterierter Form ablaufen, wobei in der Reaktionsvorschrift formal  $H \rightarrow D$  ersetzt, und die Reaktionskoeffizienten entsprechend der unterschiedlichen kinetischen Eigenschaften angepasst werden müssen. Permutationen, die keine eigenständigen chemischen Verbindungen generieren, werden dabei ausgeschlossen (Kupper, 2014).

### 2.1.2. Chemie in der Dunkelwolke

Die Chemie innerhalb der hydrostatisch metastabilen Kerne von Molekülwolken (GMC) (siehe Abschnitt 1.2.1) wird hauptsächlich durch die Oberflächenreaktionen des Staubes bestimmt. Bei Temperaturen von  $10 - 20$  K sind beinahe alle Stoffe außer Helium und Wasserstoff ausgefroren. Die relativ hohe Dichte und die immernoch vorhandene diffuse Einhüllende der Molekularen Wolke schirmen den Kern effektiv gegen hochenergetische UV-Strahlung ab. CRP Partikel können jedoch weiterhin in den Kern eindringen und seine äußeren Bereiche aufheizen. Dies ermöglicht die Entstehung von einfachen Molekülen bis hin zu komplexen präbiotischen Verbindungen mit dutzenden von Atomen. Beinahe alle Stoffe liegen in molekularer Form vor (Herbst, 2001), wobei  $CO$  die am häufigsten beobachtete gasförmige Verbindung neben  $H_2$  ist. Dies liegt zum Einen an seiner hohen Volatilität, die es erst spät ausfrieren lässt, als auch an seiner hohen Bindungsenergie von  $13$  eV, wodurch sich  $CO$  auch noch in stärker bestrahlten Bereichen nachweisen lässt. In den Eismänteln um die Staubkörner wurden die Verbindungen  $H_2O$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $CH_3OH$  und in kleinere Anteilen  $CH_4$ ,  $NH_3$ ,  $H_2CO$  sowie  $HCOOH$  nachgewiesen (Gibb et al., 2004). Durch die geringen Materieflüsse in der hydrostatischen Konfiguration der Wolke, kann die radiale Mischung der Spezies vernachlässigt werden. Wichtige Parameter für die Beschreibung der Dunkelwolkenphase sind demzufolge das äußere Strahlungsfeld, die genaue Modellierung der Oberflächenreaktionen und die Temperaturbalance zwischen Gas

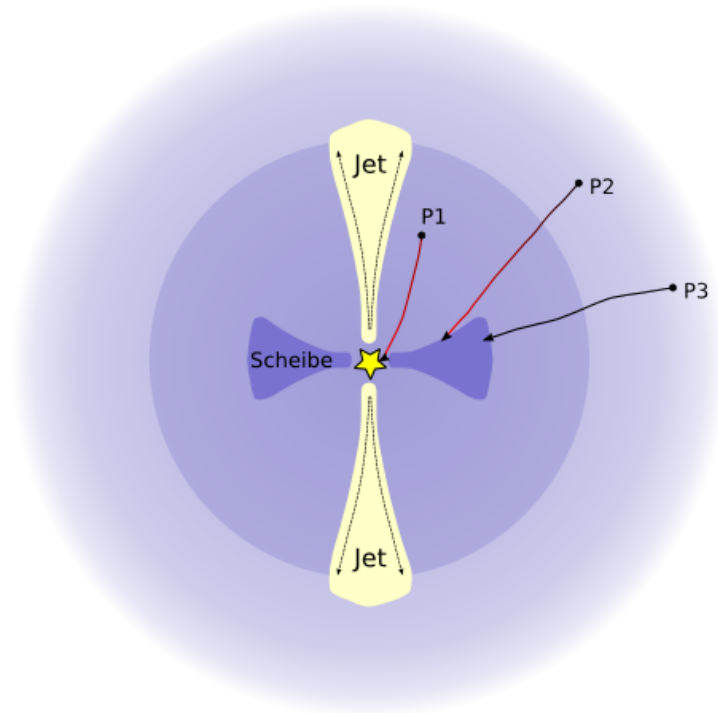
und Staub.

### 2.1.3. Chemie während des Kollapses

Während des Kollapses und der damit verbundenen graduellen Erwärmung des Gas-Staub Gemisches durch die Kompression des Gases beim Sturz in Richtung Zentrum des SN, desorbieren zuerst die volatilsten Spezies von der Stauboberfläche, allen voran  $CO$ . Gleichzeitig beginnen die verbliebenen Substanzen unter Einfluß der höheren Temperatur komplexere Verbindungen aufzubauen. Mit Eintritt des Gas-Staub Gemisches in die “Hot Corino” Region um den neu gebildeten Stern, beginnen sich auch die letzten volatilen Substanzen zu verflüchtigen und das “nackte” Staubkorn bleibt zurück. Steigt die Temperatur auf ca. 1500 K, trennen sich auch die Kohlenstoff- und Siliziumverbindungen und das Staubkorn dissoziiert in seine atomaren Bestandteile bzw. Ionen (Visser et al., 2009, 2011). Die Bedeutung der Neutral-Neutral Reaktionen in der Gasphase nimmt mit steigender Temperatur beständig zu. Abhängig von der Position in der Wolke gibt es jedoch auch Bereiche, die wenig komprimiert bzw. erwärmt werden, und so ihre durch die Dunkelwolkenphase geprägte Zusammensetzung bewahren. In Abbildung 2.1 ist der Prozess für ein Staubteilchen veranschaulicht, welches in die inneren Scheibenbereiche transportiert wird. Im Hinblick auf die Bedeutung externer Strahlungsquellen ist der Beginn der Kollapsphase der Dunkelwolke noch sehr ähnlich. Durch die mit zunehmender Erwärmung einsetzende innere Strahlung der Protosonne, entsteht ein weit stärkerer Temperaturgradient als zuvor zwischen Atmosphäre und Wolkenkern. Durch die die Protosonne immer noch umgebende Einhüllende, ist die Beobachtung zur Bestimmung der Zeitskalen und zur Differenzierung der Aufheizungsphasen während des Kollapses sehr schwierig. Diese stellen jedoch die entscheidenden Parameter zur Modellierung der Kollapschemie dar. Es existieren dennoch bereits einige Modellierungsversuche (siehe Abschnit 1.5.2), die zusammen mit statistischen Untersuchungen die Kollapsphase ausreichend beschreiben können.

### 2.1.4. Chemie in der Scheibenphase

Nach dem Aufbau der Scheibe aus dem kollabierten Wolkenmaterial bilden sich mehrere Zonen mit unterschiedlichen chemischen Zusammensetzungen aus. Prinzipiell durchlaufen alle in verschiedenem Ausmaß die Erwärmungsphasen, wie sie in Abschnit 2.1.3 beschrieben wurden. Nur Material mit Ursprung in den äußeren Regionen der Wolke nahe der Rotationsebene wird in die äußere Scheibenregion transportiert, und kann so während des Kollapses sein chemisches Inventar durchgehend gefroren halten



**Abb. 2.1.:** Schematische Darstellung der Bewegung von Materie entlang des Geschwindigkeitsfeldes während der Kollapsphase. Dargestellt sind drei exemplarische Pfade (P1, P2, P3) von Teilchenensemble (Lagrange- Paketen) mit verschiedenen Ursprungsregionen innerhalb des kollabierenden Wolkenkerns. Je nach ihrem spezifischen Drehimpuls lagern sie sich in unterschiedlichen Regionen der sich bildenden Scheibe an. Dadurch erfahren sie auf ihrem Weg verschiedene physikalische Bedingungen, welche die chemische Zusammensetzung im jeweiligen Teilchenensemble bestimmen.

Bild in Anlehnung an Herbst & Dishoeck (2009).

(Visser et al., 2011). Wegen der hohen Kompression und aufgrund viskoser Effekte wird der innere Bereich der Scheibe stark aufgeheizt, was zu einem starken radialen Temperaturgradienten führt, der sich über mehrere Größenordnungen erstreckt. Durch das Auffächern der Scheibe existiert außer in den innersten Bereichen (Innere Zone IZ) zusätzlich auch eine hohe vertikale Variation der Temperatur. Die Chemie der inneren Zone ist von hohen Temperaturen bis 2000 K und hoher Dichte bis  $n \approx 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  geprägt (Bergin & Dishoeck, 2012). Hier können auch Reaktionen von drei Partnern ablaufen und sich ein Quasigleichgewicht einstellen (Henning & Semenov, 2013).

Die Oberfläche der äußeren Scheibe (Atmosphäre AT) ist in starkem Maße Sonnenwinden, kosmischer und ultravioletter Strahlung ausgesetzt und ähnelt der photodominierten Zone (PDR) diffuser Wolken (Dishoeck et al., 2006). Die darin enthaltenen Spezies werden stark von photodissozierenden und ionisierenden Reaktionen

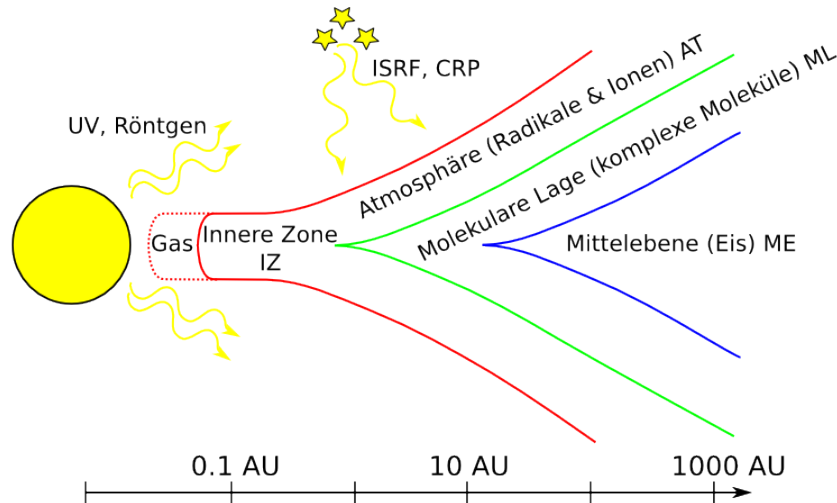
mit hohen Reaktionsraten beeinflusst, sodass sie meist in Form von Radikalen bzw. elementar vorliegen. Weil die Dichte in der Scheibenatmosphäre mit  $\text{ca. } 10^6 \text{ cm}^{-3}$  (Bergin & Dishoeck, 2012) gering ist, ist das Gas thermisch nur schwach an den Staub gekoppelt und kann sich durch den äußeren Strahlungseinfluss stark aufheizen. Der chemische Zustand in der Atmosphäre ändert sich erst, wenn mit zunehmender Eindringtiefe ein Großteil der Photonen absorbiert wird, und die Raten der bindungsformenden Reaktionen in dieselbe Größenordnung kommen wie die der dissoziierenden Effekte. Im Gegensatz dazu ähnelt die äußere Mittelebene (ME) in ihren Bedingungen dem Kern der Dunkelwolke. Die meisten Stoffe sind bei den hier herrschenden niedrigen Temperaturen  $T < 30 \text{ K}$  auskondensiert, und Strahlung wird durch die höheren Lagen absorbiert. Zwischen diesen beiden extremen Zonen entsteht eine mittlere Schicht (Molekulare Lage ML), in der sich bei moderaten Temperaturen eine reichhaltige Chemie bilden kann (Gorti et al., 2009). Diese Zusammenhänge sind in Abbildung 2.2 verdeutlicht. Zusätzlich ist in Tabelle 2.1 eine Übersicht über die in der jeweiligen Scheibenzone dominierenden chemischen Reaktionen gegeben.

Die Verteilung der chemischen Stoffe hängt von mehreren Effekten ab. Zum Einen ist die Staubverteilung in der Scheibe entscheidend für die Abschirmung der äußeren Strahlung und für Reaktionen, die auf der katalytischen Wirkung des Staubes basieren. Desweiteren gilt es als sicher, dass während der Scheibenphase Koagulationsprozesse ablaufen, die zu einer Modifikation der Größenverteilung des Staubes im Vergleich zur Wolkenphase führen. Wegen der thermodynamischen Kondensationssequenz (TCS) kondensieren bei abnehmender Temperatur zuerst die refraktärsten Stoffe aus, während die volatilsten erst wesentlich später feste Form annehmen (Albarède, 2009). Daher ist die Scheibenstruktur bei verschiedenen Abständen vom Kern von Ebenen durchsetzt, in denen es zu Phasenübergängen (gasförmig  $\rightarrow$  fest) einzelner Stoffe kommt, und die verallgemeinert Eislinien genannt werden. Beispielsweise ist der Hauptteil des Materials, aus dem die inneren Planeten gebildet werden, bereits bei unter  $1200 \text{ K}$  auskondensiert (Bond et al., 2010a). Dies ist schon in einem geringen Abstand zur Protosonne möglich, während die Eislinien der meisten volatilsten Stoffe sich wesentlich weiter außen befinden. Die Strahlung, die von der Protosonne emittiert wird, weist hohe Anteile an  $L\alpha$  Linien (UV)- und Röntgenstrahlung auf (Feigelson & Montmerle, 1999). Da diese sehr energiereich sind, haben sie auch durch die Produktion sekundärer Elektronen fundamentale Auswirkung auf die Chemie in den bestrahlten Zonen (Fogel et al., 2011). Die Auswirkungen der kosmischen Strahlung auf die Chemie ist dagegen möglicherweise nicht so stark wie bisher angenommen, da der Sonnenwind ihren Einflussbereich begrenzt (Cleeves et al., 2013). Der Sonnenwind aus energiereichen Teilchen



hat ebenfalls keine essentiellen Auswirkungen auf die Scheibenchemie unterhalb der Atmosphäre (Heinzeller et al., 2011).

Als wichtigste Parameter für die chemische Modellierung verbleiben also das Strahlungs- und Temperaturfeld sowie die Staubverteilung innerhalb der Scheibe.



**Abb. 2.2.:** Chemische Zonen innerhalb der Protoplanetaren Scheibe. Tabelle 2.1 gibt einen Überblick, welche chemischen Reaktionen jeweils vorherrschend sind. Bild in Anlehnung an Semenov (2011).

### 2.1.5. Eingangsparameter des chemischen Modells

In den letzten Abschnitten wurden die Besonderheiten astrochemischer Umgebungen im Allgemeinen, und des Solaren Nebels im Speziellen, dargestellt. Dies dient dazu, den Minimalsatz an nötigen Eingangsparametern, welche die Chemie in den jeweiligen Phasen des SN bestimmen, zu identifizieren. Für diese Arbeit werden folgende Parameter aus den physikalischen Modellen des SN in das Chemiemodul eingespeist:

- $\rho_g, \rho_d$  : Dichte der Gas- bzw. Staubphase
- $T_g, T_d$  : Temperatur der Gas- bzw. Staubphase
- $\zeta$  : Rate der CRP Strahlung je  $H_2$  Molekül
- UV Strahlungsfeld bzw. nichtdimensionale Eindringtiefe  $\tau$

Reaktionsprozess	Formel	IZ	AT	ML	MP
<b>Synthese</b>					
Radiale Assoziation	$A + B \rightarrow AB + h\nu$	✓	✓	✓	✓
Oberflächenformation	$A + B \parallel gr \rightarrow AB + gr$	□	□	✓	✓
Reaktionen 3. Ordnung	$A + B + C \rightarrow AB + C$	✓	□	□	□
<b>Analyse</b>					
Photodissoziation	$AB + h\nu \rightarrow A + B$	✓	✓	✓	□
Dissoziation durch CRP	$AB + CRP \rightarrow A + B$	□	□	✓	✓
Dissoziative Rekombination	$AB^+ + e^- \rightarrow A + B$	✓	✓	✓	✓
<b>Restrukturierung</b>					
Neutral-Neutral	$A + BC \rightarrow AB + C$	✓	□	✓	✓
Ion-Neutral	$A^+ + BC \rightarrow AB^+ + C$	✓	✓	✓	✓
Ladungstransfer	$A^+ + BC \rightarrow A + BC^+$	✓	✓	✓	✓
<b>Unveränderte Bindungen</b>					
Photoionisation	$AB + h\nu \rightarrow AB^+ + e^-$	✓	✓	✓	□
Ionisation durch CRP	$AB + CRP \rightarrow AB^+ + e^-$	□	□	✓	✓

**Tabelle 2.1.:** Dominante Reaktionen in der jeweiligen Scheibenregion. Die einzelnen Reaktionsprozesse sind in Abschnitt 2.1.1 im Detail erläutert.

Die Einordnung der Reaktionstypen erfolgt nach Henning & Semenov (2013).

## 2.2. Modellierung des Wolkenkerns

Wie in Abschnitt 2.1.2 beschrieben, sind für die chemische Entwicklung der Wolkenphase vor allem die Strahlungswechselwirkungen des ISRF mit der Wolkenatmosphäre und die Energiebalance des Gas-Staubgemischs entscheidend. Im Folgenden wird das zur Bestimmung dieser Größen verwendete physikalische Modell vorgestellt. Es basiert auf dem Modell von Kupper (2014) und wurde bereits in zwei veröffentlichten Studien unter Mitwirkung des Autors der vorliegenden Arbeit (Tornow et al., 2013b, 2014) angewendet.

### 2.2.1. Dichteprofil des Wolkenkerns

Um einen möglichen Vorläufer des Sonnensystems zu modellieren, wird von einem Wolkenkern der Gesamtmasse  $M_W = M_\odot + M_{MMSN} = 1.01\dot{M}_\odot$  ausgegangen.  $M_{MMSN}$  bezeichnet dabei die minimale Masse nach dem sog. “Minimum Mass Solar Nebula” (MMSN), die zum Aufbau der Planeten nötig ist (Crida, 2009). Die Entstehungsregion des Sonnensystems wird als eher ruhig angenommen, sodass etwaige Einflüsse durch Materietransport vernachlässigt werden können. Ausgangspunkt ist ein quasi stationärer Kern, der sich im hydrostatischen Gleichgewicht zwischen Eigengravitation und thermischem Druck befindet (siehe Abschnitt 1.2.1):

$$F_P = \frac{1}{\rho} \nabla P = -\nabla \phi = F_G \quad (2.30)$$

mit dem Gravitationspotential  $\phi$  und dem Druck  $P$ . Beobachtungen haben gezeigt, dass für kleine Kerne die Auswirkungen von zusätzlichen Druck erzeugenden Effekten wie Turbulenz und magnetischen Feldern vernachlässigt werden können (Kirk et al., 2006). Bei sphärischer Symmetrie entspricht dies

$$\frac{1}{\rho} \frac{dP}{dr} = \frac{c_s^2}{\rho} \frac{d\rho}{dr} = -\frac{d\phi}{dr} \quad \Leftrightarrow \quad -c_s^2 \frac{d(\ln \rho)}{dr} = \frac{d\phi}{dr}, \quad (2.31)$$

wobei zusätzlich die ideale Gasgleichung ausgenutzt wurde. Aus der Poissongleichung  $\Delta\phi = 4\pi G\rho$  erhält man in sphärischen Koordinaten:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d\phi(r)}{dr} \right) = 4\pi G\rho(r) = 4\pi G\rho_c e^{(-\phi c_s^{-2})}, \quad (2.32)$$

woraus sich durch Kombination mit Gleichung 2.31 die auf Bonnor (1956) zurückgehende Gleichung 2.33 ergibt:

$$\frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d \ln \rho}{dr} \right) = -\frac{4\pi G}{c_s^2} \rho r^2 \quad (2.33)$$

Für diese Gleichung lässt sich mit dem Ansatz  $\rho(r) = \alpha r^\beta$  und den Parametern  $\alpha$  und  $\beta$  bereits eine Lösung, die selbstähnliche Singuläre Isothermale Sphäre (SIS), finden (siehe

Kupper (2014) für Details). Dieser Ansatz zeigt allerdings für  $r \rightarrow 0$  eine unphysikalische Massendichte. Eine Lösung ohne dieses Manko lässt sich erzielen, indem die Variablen  $\psi = \frac{\phi}{c_s^2}$  und  $\xi = \left(\frac{4\pi G \rho_c}{c_s^2}\right) r$  eingeführt und in Gleichung 2.32 substituiert werden. Dadurch kann diese auf die allgemeinere Form der Lane-Emden Gleichung umgeformt werden:

$$\frac{1}{\xi^2} \frac{d}{d\xi} \left( \xi^2 \frac{d\psi}{d\xi} \right) = e^{-\psi} \quad (2.34)$$

Die Lösung dieser Gleichung mit den Randbedingungen  $\psi(0) = 0$  und  $\left. \frac{d\psi}{d\xi} \right|_{\xi=0} = 0$  wird Bonnor-Ebert-Sphäre (BES) genannt. Sie lässt sich numerisch mit Methoden wie dem Shooting- oder Neumann-Verfahren berechnen (Press et al., 1992). Im Gegensatz zur SIS hat die BES einen definierten Radius und eine reguläre Ableitung.

Wolkenkerne sind meist noch von einer diffusen, nicht gravitativ gebundenen Einhüllenden umgeben. Um deren Abschirmungseffekte zu berücksichtigen, wird weiterhin ein zusätzlicher Bereich konstanter Dichte  $\rho_{env} = \text{const.}$  über die Grenze des eigentlichen Kerns hinaus angenommen. Sein Ausmaß  $R_{env}$  bestimmt sich aus der angenommenen Abschirmungsstärke  $A_v = (\ln 10)^{-1} \cdot \int_{R_W}^{R_{env}} \rho_{env} \kappa dr$ , mit dem gemittelten Absorptionskoeffizienten  $\kappa$ . Das nachfolgend beschriebene Temperaturprofil wird bis  $R_{env}$  bestimmt, während die Lösung der BES nur bis  $R_W$  definiert ist.

In der Einhüllenden wird die Bewegung des Staubes aufgrund des Strahlungsdrucks des ISRF zugelassen (Whitworth & Bate, 2002). Die Entwicklung der anfänglich in einem Verhältnis von 1/100 zum Gas gesetzten Massendichte des Staubes (Index  $d$ ) erfolgt entsprechend der Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{\partial \rho_d}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 v_d \rho_d) = 0 \quad (2.35)$$

Dementsprechend ergibt sich ein quasistationärer Kern, da die Randbedingung der BES, und damit auch Gleichung 2.34 selbst, durch diesen Zusammenhang zeitabhängig wird.

### 2.2.2. Temperaturgleichgewicht im Wolkenkern

Gleichung 2.34 beinhaltet die Annahme eines konstantes Temperaturprofils, welches so nicht im Wolkenkern vorliegt (Launhardt et al., 2013). Für die Bestimmung von  $T(r)$  wird im Folgenden eine lokale Temperaturbalance angenommen. Da bei den geringen Dichten in der Wolkenphase nur eine geringe thermische Kopplung zwischen Gas und Staub vorliegt, muss der Temperaturverlauf  $T_g(r)$  und  $T_d(r)$  getrennt betrachtet werden. Dagegen können Wärmeleitungseffekte vernachlässigt werden. Durch den gewählten Ansatz eines lokalen Temperaturgleichgewichts, muss für jeden radialen Punkt eine Balance

zwischen heizenden und kühlenden Effekten gegeben sein, so dass sich die Bilanzen folgendermaßen ergeben:

$$\text{Gas:} \quad \Gamma_{cr} - \Lambda_{gas} + \Gamma_{photo} - \Lambda_{photo} + f_z \Gamma_{H_2} - g_{coll}(T_g - T_d) = 0 \quad (2.36a)$$

$$\text{Staub:} \quad \Gamma_{dust} + (1 - f_z) \Gamma_{H_2} - \Lambda_{dust} + g_{coll}(T_g - T_d) = 0 \quad (2.36b)$$

Die Bedeutung der einzelnen Terme ist in Tabelle 2.2 erklärt. Im Allgemeinen gilt, dass die Aufheizung des Gases direkt durch die Absorption von UV- und CRP-Strahlung, sowie indirekt durch die von ihr ausgelösten chemischen Reaktionen hervorgerufen wird. Einen für das Gas kühlenden Effekt hat die Bandemission aus angeregten Schwingungs- oder Rotationszuständen, sowie die Linienemission bei strahlender Rekombination. Der Staub kühlt sich über Kontinuumsmission ab, wird aber gleichzeitig durch UV-Strahlung und auf seiner Oberfläche generierte Reaktions(ab)wärme aufgeheizt. Gas und Staub stehen desweiteren über inelastische Kollisionen in Wechselwirkung (Whitworth & Bate, 2002), und können so für den jeweils anderen zur Quelle bzw. Senke von thermischer Energie werden (Goldsmith, 2001).

Die externe Strahlungsquelle des ISRF stellt die hauptsächliche Quelle für Strahlungsenergie dar. Seine spektralen Eigenschaften können durch die geeignete Kombination verschiedener Schwarzkörper mit entsprechender Abschirmung approximiert werden (Zucconi et al., 2001). Für die Abschirmung des ISRF aufgrund der Opazität des Staubes, ist dessen Größenverteilung innerhalb des Wolkenkerns von entscheidender Bedeutung. Dementsprechend hängen die Profile für  $T_{g,d}$ ,  $\rho_{g,d}$  auch von dem verwendeten Staubensemble ab. Die Unterschiede, die sich für das Temperatur- und Dichteprofil, und somit für die chemische Zusammensetzung durch Verwendung des MRN- (Mathis et al., 1977) bzw. Zubko- Ensembles (Zubko et al., 2004) ergeben, wurden in Tornow et al. (2013b) untersucht. Signifikante Unterschiede resultieren demnach aufgrund des veränderten Abschirmungsprofils.

Da einige Terme in Gleichungen 2.36 nichtlinear von  $T$  abhängen, muss auch dieses Gleichungssystem numerisch approximiert werden. Aufgrund der Form der Gleichung kann sie als Problem der Nullstellenbestimmung aufgefasst und mithilfe des Newton-Raphson Verfahrens gelöst werden (Press et al., 1992).

### 2.2.3. Kopplung von Dichte- und Temperaturprofil im Wolkenkern

Wie in Abschnit 2.2.1 beschrieben, basiert die BES auf einem konstanten Temperaturprofil  $T(r) = \text{const.}$  Durch die einfallende Strahlung und die sich damit räumlich ändernden heizenden bzw. kühlenden Terme in Gleichung 2.36, wird die Temperatur jedoch ebenfalls

Gas	
Kühlende Effekte	
$\Lambda_{gas}$	Linienemission von angeregten Rotations- oder Vibrationszuständen der Moleküle $H_2, CO, HCN$
$-g_{coll}$	Wechselwirkungsterm zwischen Gas und Staub aufgrund inelastischer Stöße gemäß (Goldsmith, 2001)
$\Lambda_{photo}$	Linienemission durch rekombinierende Elektronen
Heizende Effekte	
$\Gamma_{cr}$	Absorption von kosmischer Strahlung durch die Hauptkomponenten $H, H_2, He$
$f_z \Gamma_{H_2}$	Aus der Oberflächenchemie auf dem Staubkorn in die Gasphase abgegebene, heiße $H_2$ -Moleküle.
$\Gamma_{photo}$	Aufheizung durch UV Strahlung, primär aufgrund von $H_2$ Dissoziation, sekundär durch Ionisation von $C$ oder Staubpartikeln
Staub	
Kühlende Effekte	
$\Lambda_{dust}$	Wärmestrahlung
Heizende Effekte	
$\Gamma_{dust}$	Direkte Absorption von UV Strahlung
$(1 - f_z) \Gamma_{H_2}$	Durch Oberflächenkatalyse von $H_2$ aufgenommene Restwärme
$g_{coll}$	Wechselwirkungsterm zwischen Staub und Gas aufgrund inelastischer Stöße gemäß (Goldsmith, 2001)

**Tabelle 2.2.:** Terme in den Bilanzgleichungen 2.36, die das lokale Temperaturgleichgewicht zwischen heizenden und kühlenden Effekten der Gas- und Staubphase im Wolkenkern bestimmen. Die meisten Strahlungsgrößen werden über empirische Parameter bestimmt. Für eine genaue Beschreibung wird auf Kupper (2014) und die intern gegebenen Referenzen verwiesen.

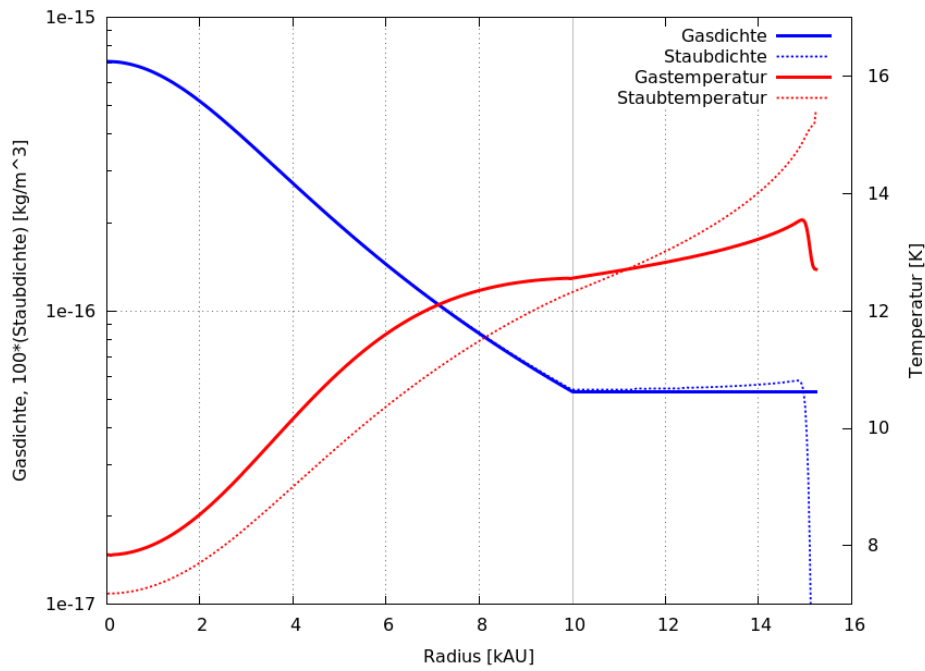
ortsabhängig. Andererseits hängt aber auch die Temperatur über die Strahlungsgrößen (und deren Abschirmung) implizit von der Dichte ab. Für eine selbstkonsistente Lösung müssen also Temperatur- und Dichteprofil durch Iterationen aneinander angepasst werden, bis die Varianz unter der hier gesetzten relativen Fehlerschranke von 0.1% liegt.

Dafür wird für einen gegebenen Randwert Gleichung 2.34 numerisch für ein konstantes Anfangs-Temperaturprofil gelöst. Mittels dieser Lösung für das Dichteprofil werden nun die dichteabhängigen Strahlungsparameter in den Gleichungen 2.36 bestimmt, und die lokale Temperaturbalance gemäß Abschnitt 2.2.2 ermittelt. Das Ergebnis dient als Ausgangspunkt einer neuen Iteration des Dichteprofiles. Dieser Prozess wird wiederholt, bis eine ausreichende Konvergenz gewährleistet ist.

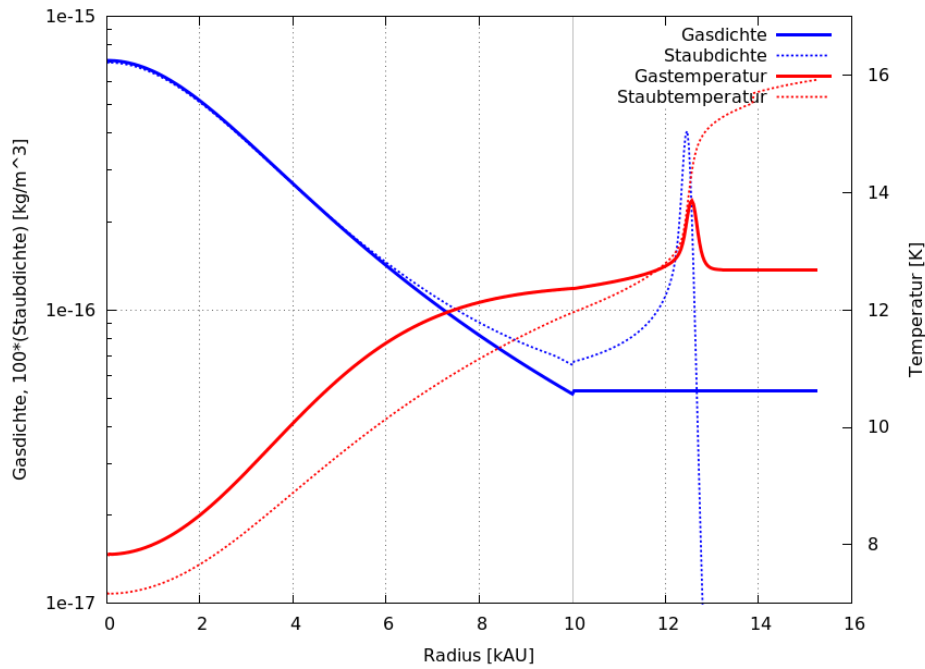
In Abbildung 2.3 ist das Ergebnis eines solchen Vorgehens am Beispiel zweier ausgewählter Zeitschritte zu sehen. Man erkennt, wie die Bewegung des Staubes Richtung Zentrum den Randwert der BES beeinflusst. Die hier dargestellten Zeitpunkte von 0, 2 und 10 Ma zeigen aber auch, dass sich zwar das Gas-zu-Staub-Verhältnis in den Randgebieten der BES ändert, es aber zu keinen, die Lösung störenden Instabilitäten kommt. Die Verwendung eines quasistationären Ansatzes ist also gerechtfertigt. Für die Chemie ergeben sich durch die Sensibilität zur verfügbaren Stauboberfläche dennoch entscheidende Änderungen in den Konzentrationen einiger Spezies. Die Wolkenphase kann eine maximale Lebensspanne von bis zu 10 Ma besitzen (Keto et al., 2006). In dieser Arbeit wird jedoch davon ausgegangen, dass bereits bei einem Alter von 6 Ma der Kollaps einsetzt.

#### 2.2.4. Simulationsprozedur während der Wolkenphase

Die Wolkenkerne bilden sich aus Verdichtungen des diffusen Materials der Molekularen Wolken, die ihrerseits aus Supernova Auswürfen und ISM bestehen. Da es jedoch nicht praktikabel ist, auch diese früheren Entwicklungsstadien in die Simulationsprozedur mit einzubeziehen, wird in dieser Arbeit von einem stabilisierten Wolkenkern als erster Phase der Sternentstehung ausgegangen. Der Wolkenkern als Startpunkt stellt in dem Sinne einen natürlichen Anfang für ein solches Unterfangen dar, als dass zum ersten Mal eine sinnvolle Trennung zwischen Universum und Solarem Nebel möglich ist. Für die chemischen Anfangskonzentrationen werden Bedingungen gewählt, die sich auf an Beobachtungen isolierter Sternentstehungsregionen (wie TMC-1 und L134N) validierte Modellrechnungen stützen (Albertsson et al., 2013; Graedel et al., 1982). Diese sind in 2.3 aufgeführt. Im Folgenden wird ihre Entwicklung in Abhängigkeit von den physikalischen Parametern, die aus dem in Abschnitt 2.2.3 beschriebenen Modell der BES resultieren, untersucht. Nach Festlegung der physikalischen Parameter



(a)



(b)

**Abb. 2.3.:** Dichte- und Temperaturprofil eines Wolkenkerns bei Verwendung eines MRN größenverteilten Staubensembles und einem Strahlungsfeld von 1 Habing. Für eine vollständige Parameterübersicht siehe Tabelle 3.1. Man erkennt deutlich den kalten Kern und die wärmere Atmosphäre, sowie den flachen, nichtsingulären Dichteverlauf. Die graue vertikale Linie bei 10 kAU markiert die äußere Grenze des Kerns  $R_W$ . In (a) ist der Zustand kurz nach der Initialisierung dargestellt, während (b) den Zustand nach 10 Ma zeigt. Durch den Strahlungsdruck des ISRF bewegt sich ein Staubpeak Richtung Zentrum.



Spezies	Relative Häufigkeit zu $n_H$	Spezies	Relative Häufigkeit zu $n_H$
$H$	$2.00 \times 10^{-3}$	$S$	$9.14 \times 10^{-8}$
$H_2$	0.499	$Si$	$9.74 \times 10^{-9}$
$HD$	$1.50 \times 10^{-5}$	$Na$	$2.25 \times 10^{-9}$
$He$	$9.75 \times 10^{-2}$	$Mg$	$1.09 \times 10^{-8}$
$C$	$7.86 \times 10^{-5}$	$Fe$	$2.74 \times 10^{-9}$
$N$	$2.47 \times 10^{-5}$	$P$	$2.16 \times 10^{-10}$
$O$	$1.80 \times 10^{-4}$	$Cl$	$1.00 \times 10^{-9}$

**Tabelle 2.3.:** Anfangsverteilung in der Wolkenphase. Die Werte geben die relative Häufigkeit in Bezug auf die Gesamtstoffmenge von atomarem Wasserstoff  $n_H$  an. Die Werte entstammen Albertsson et al. (2013).

gemäß Tabelle 3.1 ist das Modell vollständig bestimmt. Die Bewegungsgleichungen des Staubes 2.35 werden für die Einhüllende gelöst, um den Randwert der BES zu bestimmen. Anschließend wird für jeden Zeitschritt die in Abschnitt 2.2.3 beschriebene Prozedur angewandt, bis ein selbstkonsistentes Dichte-Temperaturprofil realisiert ist. Da Mischungseffekte durch Konvektion vernachlässigt werden können, wird anschließend für jeden radialen Punkt der BES die chemische Entwicklung gemäß Gleichungen 2.2 berechnet, wobei die Zeitschrittweite von Gleichung 2.35 passend gewählt werden muss. Die chemischen Entwicklungen in der Einhüllenden werden nicht berücksichtigt, da sich das dort befindliche Material nicht in der Scheibe anlagert und mit dem Einsetzen des Sonnenwindes zerstreut. Desweiteren müssten dort spezielle Techniken zur Behandlung der chemischen Entwicklung angewendet werden (Hollenbach & Tielens, 1999). Für die Berücksichtigung der Abschirmungseffekte gegenüber dem ISRF wird von einer konstanten Zusammensetzung der Wolke aus hauptsächlich neutralem, atomar vorliegendem Gas ausgegangen.

Das Endergebnis ist ein radial abhängiges Profil für jede chemische Spezies im Modell des Wolkenkerns. Diese Verteilungen dienen als chemische Anfangsbedingungen für die Kollapssimulation.

## 2.3. Kollabierender Wolkenkern

Da sich der Wolkenkern in einem metastabilen Gleichgewicht befindet, können externe oder interne Störungen zu einer Destabilisierung und somit zum Kollaps führen. Die

Darstellung des nachfolgend beschriebenen physikalischen Kollaps- Modells basiert auf den unter Mitwirkung des Autors entstandenen Studien Tornow et al. (2013a, 2014). Die physikalische Modellierung fiel dabei jedoch nicht in den Aufgabenbereich des Autors der vorliegenden Arbeit.

### 2.3.1. Semianalytische Beschreibung des Kollaps

Ausgehend von den rotationsinvarianten Gleichungen:

$$\text{Poissongleichung:} \quad \frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} = 4\pi G \rho \quad (2.37a)$$

$$\begin{aligned} \text{Impulsgleichung:} \quad \rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho u \frac{\partial u}{\partial r} = & - \frac{\partial}{\partial r} \left( P + \frac{B^2}{2\mu_B} \right) \\ & - \frac{B^2}{\mu_B r} - \rho \frac{GM}{r^2} + \rho f(u) \end{aligned} \quad (2.37b)$$

$$\text{Kontinuitätsgleichung:} \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} = - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \rho u) \quad (2.37c)$$

$$\text{Induktionsgleichung:} \quad \frac{\partial B}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r B u) = \frac{\eta}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial B}{\partial r} \right) \quad (2.37d)$$

$$\text{Zustandsgleichung:} \quad P = K_P \rho^\iota = \rho c_s^2 \quad (2.37e)$$

lassen sich die 5 Zustandsvariablen Dichte  $\rho$ , Druck  $P$ , Geschwindigkeit  $u$ , Gravitationspotential  $\phi$  und Magnetfeld  $B$  bestimmen. Statt zusätzlich die Energiegleichung zu lösen, wird für die Zustandsgleichung ein polytroper Zusammenhang angenommen. Als zusätzliche zeitabhängige Parameter kommen damit  $K_P$  und der Polytropenexponent (Verhältnis der Wärmekapazitäten bei konstantem Druck bzw. Volumen)  $\iota = c_p/c_v$  hinzu (Saigo et al., 2008), sowie die als konstant angenommene magnetische Permeabilität  $\mu_B$  und der elektrische Widerstand  $\eta$ .  $f(u)$  ist eine Funktion für den viskosen Beitrag zum Impuls. Sie besteht aus einer Approximation, die diesen Term zu einer reinen Funktion der Geschwindigkeit macht (Regev & Shaviv, 1981). Statt die Gleichungen 2.37 als Anfangswertproblem aufzufassen und numerisch zu lösen, baut das verwendete Modell auf einem semi- analytischen Ansatz auf. Dies hat den Vorteil, dass Dichte- und Geschwindigkeitsfeld exakt bestimmbar sind, und keine Diskretisierung auf einem Gitter erfolgen muss. Eine weitere Folge des semi- analytischen Ansatzes ist die Vermeidung von Schocks im Dichteprofil, die beim Einfall der Materie in den inneren Kern auftreten und bei der Lösung des chemischen Netzwerks zu Problemen führen können. Die Dichtefunktion  $\rho(r, t)$  wird dabei in vier radiale Abschnitte  $\rho_{1-4}$  unterteilt, welche jeweils einen der radialen Bereiche der kollabierenden Wolke beschreiben: Protostern, Übergangsregion zwischen Stern und sich bildender Scheibe, die Scheibe selbst und die diffuse Einhüllende.

Die funktionale Form der einzelnen Zonen ist in nachfolgender Übersicht beschrieben und basiert auf empirischen Modellen:

$$\rho(r, t) = \begin{cases} \rho_1(r, t) = \frac{\rho_{01}}{1 + (r/a_1)^{\gamma_1}}, & \text{bei } 0 \leq r \leq \omega_1(t) & \text{Protostern} \\ \rho_2(r, t) = \frac{\rho_{02}}{1 + (r/a_2)^{\gamma_2}} \left(\frac{\omega_1}{r}\right)^{\chi_2}, & \text{bei } \omega_1(t) \leq r \leq \omega_2(t) & \text{Übergangszone} \\ \rho_3(r, t) = \rho_{03} \left(\frac{\omega_2}{r}\right)^{\chi_3}, & \text{bei } \omega_2(t) \leq r \leq \omega_3(t) & \text{Scheibe} \\ \rho_4(r, t) = \rho_{04} \left(\frac{\omega_3}{r}\right)^{\chi_4} \cos^2\left(\frac{\pi r}{2R_C}\right) + \rho_{env}, & \text{bei } \omega_3(t) \leq r \leq R_C & \text{Einhüllende} \end{cases} \quad (2.38)$$

Die 14 zeitabhängigen Parameter  $\rho_{0\{\}}, \gamma_{\{\}}, a_{\{\}}, \chi_{\{\}}, \omega_{\{\}}$  werden durch folgende 18 Bedingungen beschränkt:

1. Forderung der Stetigkeit von  $\rho, u$  (sowie deren erster Ableitung) an den Zonen-  
grenzen  $\omega_{\{\}}$ :  

$$\begin{aligned} \rho_i|_{r=\omega_i} &= \rho_{i+1}|_{r=\omega_i} \\ \partial_r \rho_i|_{r=\omega_i} &= \partial_r \rho_{i+1}|_{r=\omega_i} \\ u|_{r \nearrow \omega_i} &= u|_{r \searrow \omega_i} \\ \partial_r u|_{r \nearrow \omega_i} &= \partial_r u|_{r \searrow \omega_i} \end{aligned}$$
2. Keine Materialflüsse über den Rand:  $u|_{R_C} = 0$
3. Gleiche zeitliche Änderung von  $\rho$  beidseitig der Zonengrenzen:  

$$\partial_t \rho_i|_{r=\omega_i} = \partial_t \rho_{i+1}|_{r=\omega_i}$$
4. Keine Änderung der Dichte zu Beginn und Ende der Simulation:  $\partial_t \rho|_{t=0, t_C} = 0$
5. Massenerhaltung:  $M_C = \int_0^{R_C} \rho = M_W$  für alle  $t \in [0, t_C]$

Durch geeignete Wahl der funktionalen Form von  $\rho_1$  sind die inneren Randbedingungen automatisch physikalisch sinnvoll. Für das Magnetfeld  $B$  kann der Ansatz

$$B = \sqrt{2\mu_B P_M} = \sqrt{2\mu_B K_b \rho^\beta \exp\left(\frac{u}{u_0}\right)}$$

getroffen werden.  $P_M$  bezeichnet den äquivalenten magnetischen Druck. Die zeitliche Entwicklung des Systems wird über die Minimierung der freien Parameter  $\beta \in [1 \dots 2]$ ,  $u_0$  und  $K_b$  bestimmt. Die Zielfunktion

$$H_\beta^2(u_0, K_b) \longrightarrow \min \quad (2.39)$$

wurde in Tornow et al. (2013a, Appendix B) aus den Gleichungen 2.37b, 2.37c und 2.37d hergeleitet. Die Lösung stellt derjenige Satz an Parametern dar, der einen möglichst

geringen Wert für die Zielfunktion erlaubt. Für die nichtlineare Minimierung wurde das auf MINPACK basierende Softwarepaket MPFIT verwendet (Markwardt, 2009). Um aus der anfänglichen BES Verteilung eine instabile Konfiguration zu generieren, reicht es, bei  $t = 0$  eine kleine zusätzliche Massenkonzentration im Inneren des Kerns anzunehmen. Dazu werden die Parameter  $\rho_{01}, a_1, \gamma_1, \omega_1, \gamma_1, \dots$  mit kleinen Werten initialisiert, was dazu führt, dass der radiale Gradient der hydrostatischen Lösung etwas kleiner ist als der des Ansatzes 2.38 zu Beginn des Kollapses.

### 2.3.2. Lagrange-Behandlung der Chemie während der Kollapsphase

Während des Kollapses findet ein Großteil der Akkretion der Protosonne statt. Die damit zusammenhängenden Materialflüsse verhindern eine lokale Beschreibung der Chemie wie in der Wolkenphase. Die Verteilung jeder Spezies  $X$  müsste daher über die Kontinuitätsgleichung 2.37c, unter zusätzlicher Berücksichtigung der lokalen chemischen Umwandlungen, bestimmt werden:

$$\frac{\partial \rho_X}{\partial t} = -\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \rho_X u) - S_X \quad (2.40)$$

Dabei beschreibt  $u$  das Geschwindigkeitsfeld,  $\rho_X$  die Massendichte des Stoffes  $X$  und  $S_X$  Quellterme aufgrund von chemischen Umwandlungsprozessen zwischen den Stoffen entsprechend der rechten Seite von Gleichung 2.2. Hier sind die Konzentrationen allerdings in komplexer Weise räumlich gekoppelt, so dass ein hochdimensionales System partieller Differentialgleichungen gelöst werden muss. Wegen des hohen relativen Anteils von  $H$  und  $H_2$  an der Gesamtdichte  $\rho_{tot} \approx \rho_{H_{tot}}$ , kann man jedoch davon ausgehen, dass sich alle anderen Spezies als sog. Tracersubstanzen mit dem von  $H$  und  $H_2$  bestimmten Geschwindigkeitsfeld mitbewegen und ihre Reaktionen überdies keine signifikante Änderung der Gesamtdichte zur Folge haben. Unter dieser Annahme ist es zulässig die mittlere Teilchenmasse  $\bar{m} = \mu m_H$  einzuführen, wobei  $m_H$  die Masse eines Wasserstoffatoms und  $\mu = 2.34$  der auf Wasserstoff normierte gewichtete Mittelwert der vorhandenen Moleküle darstellt. Mit dieser Hilfsgröße lässt sich die Massendichte des Stoffes  $\rho_X$  in seine Teilchenzahldichte  $N_X = \rho_X / \bar{m}$  transformieren.

Falls weiterhin die Diffusion gegenüber der Konvektion vernachlässigbar ist, ergibt sich durch Lagrange- Transformation ins mitbewegte Koordinatensystem einer Gasparzelle mit konstanter Teilchenzahl wieder Gleichung 2.2:

$$\frac{dN_X}{dt} = S_X = \sum_{j=1}^N k_{ij} X_i$$

Der Kollaps kann durch seine kugelsymmetrische, eindimensionale Beschreibung mit einem laminaren Prozess verglichen werden, bei dem auf der relevanten Größenskala kaum

eine chemische Durchmischung stattfindet. Die radiale Relation zwischen Bereichen mit ähnlichen dynamischen Eigenschaften bleibt somit erhalten. Entsprechend kann die Entwicklung der chemischen Konzentrationen entlang der durch das Geschwindigkeitsfeld vorgegebenen Lagrange- Pfade berechnet werden. Es ergibt sich eine Gleichung analog zu 2.2, in der die Temperatur, Dichte und Strahlung nur von der Zeit explizit abhängen. Durch diese Betrachtung kann zur Behandlung der Chemie während der Kollapsphase derselbe Algorithmus wie im Falle der chemischen Entwicklung im Wolkenkern verwendet werden.

Zur Bestimmung der physikalischen Eigenschaften wird demnach gemäß Abschnitt 2.3 vorgegangen. Das ermittelte Geschwindigkeitsfeld  $u$  bestimmt die Bewegung des Gas-Staub- Pakets gemäß:

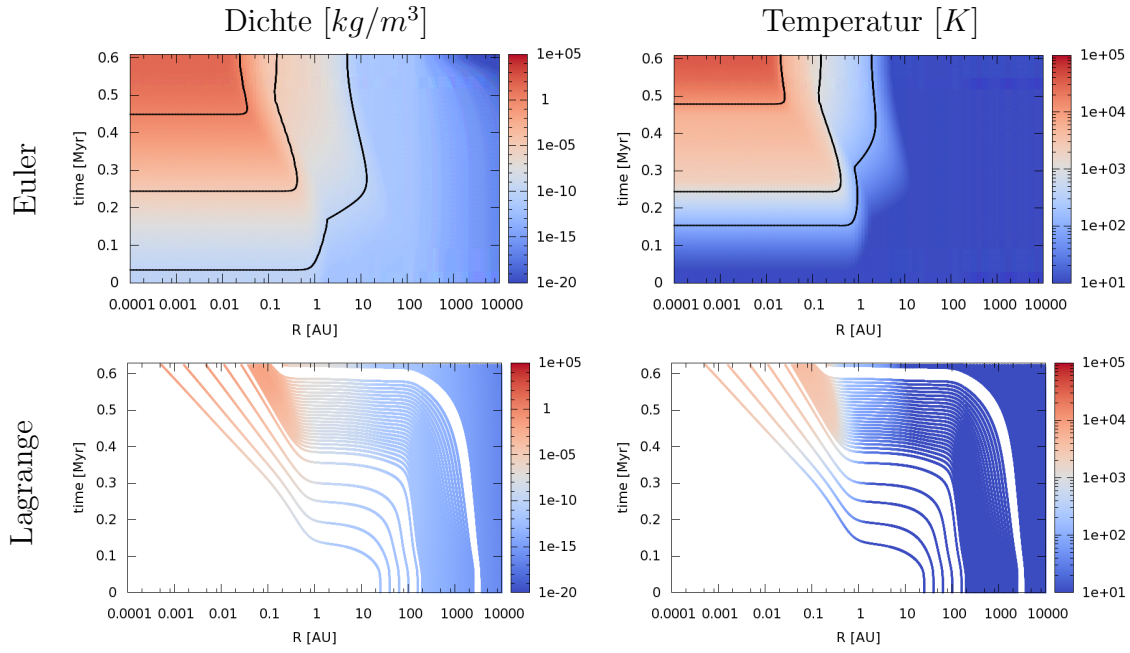
$$r(t) = r_0 + \int_{t_0}^t u(r, t') dt' \quad (2.41)$$

Die Position  $r(t)$  bestimmt die für die Chemie wichtigen Eingangsparameter  $\rho, T, \zeta, \tau$  (s. Abschnitt 2.1.5). In Abbildung 2.4 sind die Ergebnisse für den Euler- und Lagrange-Ansatz einander gegenübergestellt. In der oberen Zeile sind die nach Abschnitt 2.3.1 berechneten physikalischen Größen Dichte und Temperatur im kontinuierlich gegebenen Ortsraum (Euler) aufgetragen, während die untere die Lagrange- Pfade eines Gaspakets entlang des Geschwindigkeitsfeldes mit den aufgeprägten physikalischen Eigenschaften darstellt. Ist die Abdeckung des Ortsraums durch die Lagrange- Pfade dicht genug, lässt sich aus ihnen durch geeignete Interpolation wieder der Ortsraum und die chemische Verteilung rekonstruieren.

## 2.4. Scheibenstadium

Protoplanetare Scheiben sind relativ langlebige Strukturen, die von Prozessen wie Akkretionflüssen, Scheibenwinden und Drehimpulstransport bestimmt werden. Die langsame Entwicklung ist dabei das Resultat der Drehimpulserhaltung. Um Akkretionsflüsse stattfinden zu lassen, muss gleichzeitig Drehimpuls nach außen transportiert werden. Dies geschieht durch viskose Effekte zwischen radial benachbarten Scheibensegmenten, die sich aufgrund ihrer unterschiedlichen Geschwindigkeiten<sup>7</sup> aneinander scheren. Da die molekulare Viskosität in Regionen geringer Dichte um Größenordnungen zu klein ist um die Ursache für diese Scherung zu sein, fällt sie auch als Ursache für den Drehimpulstransport aus. Als alternative Mechanismen des Drehimpulstransports wurden unter anderem die turbulente Viskosität, gravitative Instabilitäten (Boss, 1997) und die Magnetorotationsinstabilität (MRI) (Balbus & Hawley, 1991) vorgeschlagen. Die Turbulenz

<sup>7</sup>Die unterschiedlichen radialen Geschwindigkeiten folgen aus dem Zentralpotential  $\frac{d\Phi}{dr} = \frac{v_\phi^2}{r}$ .



**Abb. 2.4.:** Gegenüberstellung der Euler- (oben) und der Lagrangedarstellung (unten) während des Kollapses. Die zeitliche Entwicklung der physikalischen Größen Dichte (links) und Temperatur (rechts) ist über dem Ort aufgetragen. Die Berechnung der physikalischen Größen erfolgt nach Abschnitt 2.3.1 im Ortsraum (Euler). Über das so erhaltene Geschwindigkeitsfeld können mit Gleichung 2.41 die Trajektorien der Gas-Staub-Parzellen (unten) berechnet werden. Über ihre Position  $r(t)$  werden die für sie dort vorliegenden physikalischen Größen als Eingangsparameter in das Chemiemodul eingespeist, um dort die Konzentrationen der jeweiligen Spezies zu bestimmen.

lässt sich über die nicht-diagonalen Anteile des Reynolds- Spannungstensors beschreiben (Cuzzi et al., 1993). Die MRI kann mit demselben Formalismus behandelt werden (Balbus & Papaloizou, 1999), so dass sich der lokale Spannungstensor in einer durch Zylinderkoordinaten parametrisierten Scheibe über

$$W_{r,\phi} = \left\langle \delta v_r \delta v_\phi - \frac{B_r B_\phi}{4\pi\rho} \right\rangle_\rho \quad (2.42)$$

ausdrücken lässt (Armitage, 2011). Dabei repräsentieren  $\delta v_{r,\phi}$  die Komponenten des fluktuierenden Geschwindigkeitsfeldes, mit  $\delta v_\phi = v_\phi - r\Omega_K$ , wobei  $\Omega_K$  die Keplersche Rotationsgeschwindigkeit bezeichnet.  $B_{r,\phi}$  sind die Komponenten des ebenfalls fluktuierenden magnetischen Feldes. Die Klammern  $\langle \rangle_\rho$  stehen für die Mittelung über die Dichte. Der lokale Spannungstensor  $W_{r,\phi}$  setzt sich also aus der turbulenten Reynolds- und der magnetischen Maxwellspannung zusammen. Seine beiden Komponenten sind proportional zur Energiedichte im jeweiligen Feld.

Die ebenfalls als Möglichkeit für den Drehimpulstransport genannten, durch Selbstgravitation ausgelösten Instabilitäten, spielen für leichte Scheiben mit  $M_{disk} < 0.05 M_{\odot}$  nur eine untergeordnete Rolle. Treten diese jedoch auf, können durch die langreichweitige Wirkung der Gravitation globale, nicht-axialsymmetrische Strukturen wie Spiralarme und lokale Verdichtungen auftreten (Ilee et al., 2011), die sich nicht in den lokalen Spannungstensor-Formalismus integrieren lassen. Eine Protoplanetare Scheibe ist stabil gegen gravitative Instabilitäten, falls sie überall einen Toomre Parameter

$$Q = \frac{c_s \Omega_K}{\pi G \Sigma} > 1 \quad (2.43)$$

aufweist (Toomre, 1964). Dies ist für die in dieser Arbeit untersuchten Scheibenparameter erfüllt.

Für das Auftreten der MRI ist der Ionisierungsgrad der Scheibe von entscheidender Bedeutung. Dessen Bestimmung ist ein aktives Forschungsfeld, und gehört somit auch für die dynamische Entwicklung der Scheibe zu den zentralen Fragen (Ilgner & Nelson, 2008). Die Effizienz der MRI hängt von der Kopplung des Magnetfeldes an die hauptsächlich neutrale Scheibe ab, und erfordert daher das häufige Auftreten von Ion-Neutral-Stößen (siehe Abschnitt 2.1.1). Da die Anwesenheit von Staubteilchen im Allgemeinen zu einer schnellen Verminderung der freien Elektronen und damit freier Ladung führt (Sano et al., 2000), können bestimmte Zonen stabil gegen die MRI werden. Diese “magnetisch toten”, und damit weniger turbulenten Zonen, wurden als aussichtsreiche Kandidaten für die Planetenentstehung ausgemacht (Matsumura & Pudritz, 2003).

Viele Studien verwenden jedoch statt des vollen Spannungstensors eine auf Shakura & Sunyaev (1973) zurückgehende Parametrisierung der Viskosität, um den bis heute nicht komplett verstandenen Mechanismus des Drehimpulstransportes zu beschreiben (Armitage, 2011). Aus der Kombination von Scheiben-Skalenhöhe  $h_g$  und Schallgeschwindigkeit  $c_s$  wird bei diesem Ansatz eine Größe der richtigen physikalischen Dimension konstruiert, die zusätzlich durch einen einheitenlosen Parameter  $\alpha$  skaliert wird. Dieses Modell hat sich als sehr erfolgreich erwiesen, und ist in der Lage, die grundlegenden Beobachtungen, wie z.B. die Scheibenstruktur und SEDs, zu erklären (Lynden-Bell & Pringle, 1974). Außerdem hat sich gezeigt, dass in erster Ordnung sämtliche Effekte des Spannungstensormodells durch das sog.  $\alpha$ -Scheibenmodell<sup>8</sup> approximiert werden können (Balbus & Papaloizou, 1999), falls das gemittelte Geschwindigkeitsprofil der Strömung und die zum Magnetfeld gehörenden Alfvén Geschwindigkeiten mit der Schallgeschwindigkeit  $c_s$  skalieren (Armitage, 2011). In der obigen Schreibweise entspricht dies der

<sup>8</sup> $\alpha$  kann dabei auch als Skalierungsfaktor für die maximale Wirbelgröße gesehen werden (Pringle, 1981).

Annahme:

$$W_{r,\phi} = \alpha c_s^2 = \nu \Omega_K, \quad (2.44)$$

mit der turbulenten Viskosität  $\nu$ . Realistische Werte des Parameters  $\alpha$  sind auf das Intervall  $\alpha \in [10^{-3} \dots 10^{-2}]$  beschränkt (Makalkin & Dorofeeva, 2009). Eine Folge dieses Modells ist jedoch die Vorhersage für das mögliche Auftreten von auswärtsgerichteten meridionalen Materie-Flüssen entlang der Zentralebene. Diese werden durch einen starken Druckgradienten ausgelöst, wobei der vertikal integrierte Fluss stets positiv, d.h. auf den Stern gerichtet, bleibt. Diese Eigenschaft konnte zwar bis jetzt nicht durch Magneto-hydrodynamik (MHD) Studien, die den vollen Spannungstensor entsprechend Gleichung 2.42 benutzen, reproduziert werden (Fromang et al., 2011; Jacquet, 2013). Da jedoch auch in der Kollapsphase meridionale Ausflüsse vorhergesagt werden (Tscharnutter et al., 2009), wird ihre Existenz in dieser Arbeit nicht von vornherein ausgeschlossen. Das Auftreten von meridionalen Materie-Ausflüssen wird desweiteren oft herangezogen um geologische Funde, wie z.B. die Verbreitung von kristallinen Calcium-Aluminium-reichen Einschlüssen (CAI) im äußeren Sonnensystem, zu erklären (Wehrstedt, 2004). Im Folgenden wird das auf die  $\alpha$ -Annahme aufbauende dynamische Modell der Scheibe erläutert.

### 2.4.1. Dichtemodell der Scheibe

Die Herleitung der Bewegungsgleichungen für die SN-Materie basiert auf der Idee einer zweikomponentigen Flüssigkeit. Die beiden Phasen bewegen sich mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten und interagieren über hydrodynamische Wechselwirkung. Obwohl zusätzliche Effekte wie Druckunterstützung (durch das Gas) und hydrodynamischer Widerstand (aufgrund der Staubbewegung) eine Rolle spielen, lässt sich zeigen, dass sich die Scheibe im Wesentlichen mit der vom Keplerschen Gesetz bestimmten Rotationsgeschwindigkeit bewegt. Die radialen Änderungen der Geschwindigkeit über eine Rotationsperiode sind sehr gering gegenüber der tangentialen Geschwindigkeit, weshalb man dazu übergehen kann nur die dynamische Zeitskala der radialen Drift zu betrachten, und die Rotation adiabatisch zu eliminieren. Dies entspricht der Annahme  $\Delta\rho \Omega_K \approx 0$ . Für die Parametrisierung der Scheibe genügt also die Betrachtung der  $r, z$  Ebene, was äquivalent zur Annahme der Achsensymmetrie von  $\partial_\phi = 0$  ist.

Die Impulsgleichung für das Gas der Protoplanetaren Scheibe lässt sich dann wie folgt



in Zylinderkoordinaten darstellen:

$$\text{radial:} \quad r\Omega_g^2 - \frac{GMr}{(r^2 + z^2)^{3/2}} - \frac{1}{\rho_g} \frac{\partial P_g}{\partial r} = 0 \quad (2.45a)$$

$$\text{vertikal:} \quad -\frac{GMz}{(r^2 + z^2)^{3/2}} - \frac{1}{\rho_g} \frac{\partial P_g}{\partial z} = 0 \quad (2.45b)$$

Dies entspricht der Annahme, dass die Gravitationskraft auf ein Volumenelement des Gases in vertikaler Richtung  $z$  durch den Gasdruck kompensiert wird. Es liegt also hydrostatisches Gleichgewicht vor. In radialer Richtung kommt durch die Rotation zusätzlich die Zentrifugalkraft zum Tragen, die das Gas effizient gegen die Gravitation stabilisiert. Setzt man in Gleichung 2.45b die ideale Gasgleichung  $P = \rho \cdot c_s^2$  ein und nimmt an, dass die Schallgeschwindigkeit  $c_s$  nicht von der Höhe abhängt, sowie dass  $r \gg z$  ist, lässt sich die Differentialgleichung 2.45b wie folgt für das Dichteprofil lösen:

$$\rho_g(r, z) = \rho(r, 0) \exp\left(-\frac{z^2}{2h_g^2}\right) \quad \text{mit} \quad h_g = \frac{c_s}{\Omega_K} = \sqrt{\frac{r^3 c_s^2}{GM}} \quad (2.46)$$

Dabei bezeichnet  $h_g$  die Skalenhöhe der Scheibe, die für T-Tauri Sterne gegenüber ihrer radialen Ausdehnung  $R_D$  meist vernachlässigbar ist ( $h_g \approx 0,1 R_D$ ). Aus diesem Grund kann die Dichte der Scheibe auch über ihre Zeilendichte  $\Sigma_g = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_g dz$  als Projektion auf die Mittelebene ausgedrückt werden. Eine schematische Darstellung dieser Projektion sowie die auf das Gas wirkenden Kräfte aus 2.45a ist in Abbildung 2.5 (links) gegeben. Zusätzlich wird nach Takeuchi & Lin (2002) angenommen, dass sich die folgenden Gas-eigenschaften radial gemäß eines Potenzansatzes ändern:

$$\text{Gasdichte:} \quad \rho_g(r, z) = \rho_0 \left(\frac{r}{r_0}\right)^p \exp\left(-\frac{z^2}{2h_g^2}\right) \quad (2.47a)$$

$$\text{Schallgeschwindigkeit:} \quad c_s^2(r) = c_0^2 \left(\frac{r}{r_0}\right)^q \quad (2.47b)$$

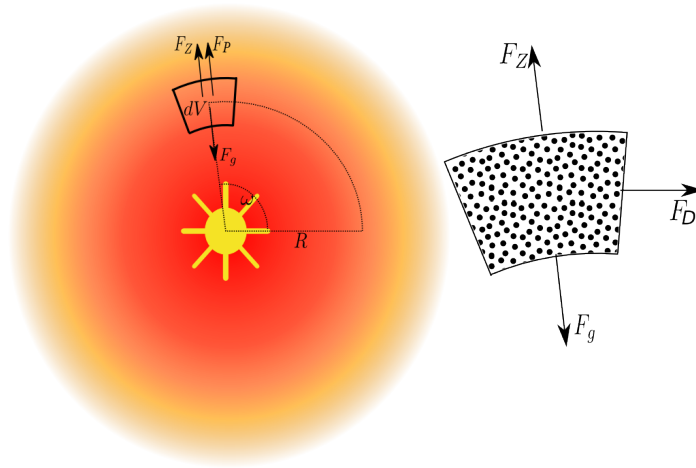
$$\text{Skalenhöhe:} \quad h_g(r) = h_0 \left(\frac{r}{r_0}\right)^{(q+3)/2} \quad (2.47c)$$

$$\text{Rotationsgeschwindigkeit} \quad \Omega_g = \Omega_K \left(1 + \frac{1}{2} \left(\frac{h_g}{r}\right)^2 \left(p + q + \frac{q}{2} \frac{z^2}{h_g^2}\right)\right) \quad (2.47d)$$

$$\text{Zeilendichte:} \quad \Sigma_g(r) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_g(r, z) r dz = \sqrt{2\pi} \rho_0 h_0 r^{p_s} \quad (2.47e)$$

$$\text{mit} \quad p_s = p + (q + 3)/2$$

$c_0, h_0$  und  $r_0$  bezeichnen hierbei die Werte bei 1 AU und  $\Omega_K = \sqrt{\frac{GM}{r^3}}$  die Keplersche Rotationsgeschwindigkeit. Die funktionale Form von Gleichung 2.47a ähnelt für die Mittelebene ( $z = 0$ ) dem Ansatz für die Scheibenzone  $\rho_3$  während der Kollapsphase (Gleichung 2.38). Dies macht eine Bestimmung der Parameter  $\rho_0$  und  $p$  aus dem Endzustand



**Abb. 2.5.:** Schematische Darstellung des Blickes von oben auf die Scheibe. Die Materie bewegt sich um die Rotationsachse des Solaren Nebels und erfährt dabei die eingezeichneten Kräfte. Links ist die Situation für das Scheibengas, rechts eine Ausschnittvergrößerung für die Staubkomponente dargestellt. Die Richtung der jeweils einwirkenden Kräfte ist durch Pfeile markiert. Die Abkürzungen stehen für:  $F_Z$  - Zentrifugalkraft,  $F_P$  - Druckkraft,  $F_g$  - Gravitationskraft,  $F_D$  - Widerstand aufgrund der Staubbewegung durch das Scheibengas.

des Kollapses besonders einfach (siehe Abschnitt 3.3). Die Parameter  $p$  und  $q$  können im Allgemeinen vom Alter der Scheibe abhängen (Makalkin & Dorofeeva, 2009), werden im Rahmen dieser Arbeit aber als konstant angenommen.

Die beiden Komponenten Gas und Staub müssen der Kontinuitätsgleichung genügen:

$$\text{Gas:} \quad \frac{\partial \rho_g}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho_g v_g) = -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho_g v_{r,g}) - \frac{\partial}{\partial z} (\rho_g v_{z,g}) \quad (2.48a)$$

$$\text{Staub:} \quad \frac{\partial \rho_d}{\partial t} = -\nabla \cdot \left( \rho_d v_d - \frac{\rho_g \nu}{Sc} \nabla \left( \frac{\rho_d}{\rho_g} \right) \right) \quad (2.48b)$$

Während Gleichung 2.48a wieder den Standardüberlegungen des Gausschen Satzes folgt, wird bei Gl. 2.48b zwischen konvektiven und diffusiven Materialflüssen unterschieden. Analog zur molekularen Diffusion wird die turbulente Diffusion über einen Gradientenansatz beschrieben, in dem angenommen wird, dass erstens die Kopplung zwischen Gas- und Staubteilchen sehr effizient ist, und zweitens keine Rückwirkung des Staubes auf das Gas besteht. Letztere Annahme kann aufgrund der geringen Staubkonzentration als valide angesehen werden, erstere ist jedoch nur in Grenzfällen erfüllt. Als Maß hierfür wird die dimensionslose Schmidtzahl  $Sc$  eingeführt. Der Fall  $Sc = 1$  beschreibt eine perfekte Kopplung zum Gas, wie sie für kleine, passive Tracer der Fall wäre. Bei großen Teilchen ist dagegen die Kopplungseffizienz aufgrund ihrer Trägheit reduziert und  $Sc \rightarrow \infty$ .

Um die Staubverteilung im stationären Zustand zu berechnen, können in Gl. 2.48b gewisse Vereinfachungen getroffen werden (Takeuchi & Lin, 2002), die es erlauben sie analytisch zu lösen. Insbesondere entfällt die zeitliche Ableitung. Für schnell sedimentierende Partikel ist zudem deren radiale Bewegung vernachlässigbar ( $\partial_z(\rho_d v_{z,d}) \gg \partial_r(\rho_d v_{r,d})$ ), sodass sich aus Gl. 2.48b der Massenstrom in  $z$ -Richtung zu Null ergibt:

$$\rho_d v_{z,d} - \frac{\rho_g \nu}{Sc} \frac{\partial}{\partial z} \frac{\rho_d}{\rho_g} = 0 \quad (2.49)$$

Das Dichteprofil des Staubes hat dann die Lösung (ebd.):

$$\rho_d(r, z) = \rho_d(r, 0) \exp \left( -\frac{z^2}{2h_g^2} \frac{Sc T_s}{\alpha} \left( \exp \left( \frac{z^2}{2h_g^2} \right) - 1 \right) \right). \quad (2.50)$$

Die Definition der sog. “Stopping Time”  $T_s$  wird im nächsten Abschnitt 2.4.2 erläutert.

### 2.4.2. Geschwindigkeitsfelder in der Scheibe

Aus der Kontinuitätsgleichung des Gases 2.48a ergibt sich mittels eines Potenzreihenansatzes unter Vernachlässigung von Termen höherer Ordnung als  $(h_g/r)^2$  die analytische Vorschrift für die Geschwindigkeit des Gases (Fromang et al., 2011)

$$v_{r,g} = -\frac{\nu}{r} \left( 3p + 2q + 6 + \frac{5q+9}{2} \left( \frac{z}{h_g} \right)^2 \right), \quad (2.51)$$

wobei der in Abschnitt 2.4 beschriebene  $\alpha$ -Ansatz für die turbulente Viskosität verwendet wird:

$$\nu = \alpha c_0 h_0 \left( \frac{r}{r_0} \right)^{q+3/2} \quad (2.52)$$

Im Gegensatz zum Gas erfährt die Staubkomponente der Materie allerdings keine Unterstützung durch die Druckkraft. Dadurch wird sich die Geschwindigkeit im Allgemeinen von der des Gases unterscheiden. Dieser Geschwindigkeitsunterschied führt dazu, dass der Staub durch seine Wechselwirkung mit dem Gas eine Beschleunigung erfährt, deren Richtung je nachdem, ob er sich gerade langsamer oder schneller als das Gas bewegt, variiert. Für Staub mit effektivem Radius  $s \leq 1$  cm und Geschwindigkeiten  $v_d \ll c_s$  kann die Epstein-Relation für den durch die hydrodynamische Wechselwirkung entstehenden Widerstand  $F_D$  (Cuzzi et al., 1993; Weidenschilling, 1977) verwendet werden:

$$F_D = \frac{4}{3} \pi \rho_g s^2 v_{th} (v_d - v_g) \quad (2.53)$$

Dabei ist  $v_{th} = \sqrt{8/\pi} c_s$  die mittlere thermische Geschwindigkeit.

Ein etwas anderer Zugang lässt sich über den Vergleich der Zeitskalen gewinnen. Die Teilchenmasse  $m$  eines Staubkorns wird dabei mit seinem Widerstandsbeiwert  $\beta = \frac{4}{3} \pi s^2 \rho_g v_{th}$

in Relation gesetzt:

$$t_f = \frac{m}{\beta} \quad \text{mit} \quad m \approx \frac{4\pi}{3} s^3 \rho_P, \quad (2.54)$$

wobei die Teilchendichte  $\rho_P$  des Staubkorns vom angenommenen Matrixmaterial abhängt (amorpher Kohlenstoff  $\approx 2 [g/cm^3]$ , Olivine  $\approx 3 [g/cm^3]$ ).

Diese sog. Reibungszeit  $t_f$  liefert so ein Maß für die Zeit, die benötigt wird um die Stauban die Gasdynamik zu koppeln. Anstelle von  $t_f$  kann auch die dimensionslose “Stopping Time” (Takeuchi & Artymowicz, 2001) verwendet werden, die als Quotient von  $t_f$  und dynamischer Zeitskala  $t_\phi = \Omega_K^{-1}|_{z=0}$  definiert ist:

$$T_s = \frac{t_f}{t_\phi} = \frac{\rho_P s \Omega_K|_{z=0}}{\rho_g v_{th}} = \frac{\rho_d s v_K|_{z=0}}{\rho_g r v_{th}}, \quad (2.55)$$

mit  $v_K|_{z=0} = r \Omega_K|_{z=0}$  der Keplergeschwindigkeit auf der Mittelebene. Aufbauend auf dem Ansatz für die Reibungszeit kann auch für den Staub ein analytischer Zusammenhang für das Geschwindigkeitsfeld gefunden werden. Es wird hier ohne Herleitung angegeben, für Details sei auf Takeuchi & Lin (2002) verwiesen.

$$v_{r,d} = v_{r,g} + v_{r,drift} \quad (2.56)$$

$$v_{r,drift} = -2\pi \left( \frac{h_0}{r_0} \right)^2 \left( p + q + \frac{q + 3}{2} \frac{z^2}{h_g^2} \right) \times \left( \frac{r}{r_0} \right)^{q+1/2} T_s \exp \left( \frac{z^2}{2h_g^2} \right) [AU/a] \quad (2.57)$$

$$v_{z,d} = -\Omega_K|_{z=0} T_s z \quad (2.58)$$

Durch die Sedimentation in vertikaler Richtung erreichen die Staubkörner schnell die Endgeschwindigkeit  $v_{z,d}$ , bei der sich  $F_g$  und Widerstandskraft  $F_D$  ausgleichen.

Besonders wichtig ist, dass das Gas in der Zentralebene durch die zusätzliche Druckunterstützung langsamer rotiert als die kondensierten Komponenten, während sich der Staub in größerer Höhe über der Symmetrieebene schneller bewegt. Die Staubpartikel erfahren also unter diesen Bedingungen entweder einen “Gegen-” oder “Rückenwind”. Die Abbremsung ihrer Rotation in der Zentralebene führt im Vergleich zum Gas zu einer schnelleren radialen Bewegung Richtung Zentrum. Da dieser Effekt größenabhängig ist, ist er insbesondere für größere Staubpartikel bedeutend und führt für diese zu einer geringeren Lebensdauer in der Scheibe.

### 2.4.3. Randbedingungen für die Scheibe

In den vorangegangenen Abschnitten wurde ein Scheibenmodell beschrieben, welches auf einer analytischen Lösung beruht. Diese Lösung kann auch dazu verwendet werden, dass sich ergebende Randwertproblem bei numerischer Lösung der Kontinuitätsgleichung

2.48 zu umgehen, indem die analytische Lösung die Werte auf dem Rand  $\partial\Omega$  des Simulationsgebiets  $\Omega$  vorgibt. Auf diese Weise lassen sich die Felder  $\rho_g, \rho_d, v_g, v_d$  behandeln. Abhängig vom jeweiligen Rand müssen jedoch unterschiedliche Effekte beachtet werden, auf die im Folgenden kurz eingegangen wird.

### Innerer Rand - Übergang zur Protosonne

Ein weiterer Effekt, der die inneren Scheibenbereiche in den YSO maßgeblich beeinflussen kann, sind die vertikal austretenden, bipolare Jets. Ihr Auftreten hängt im Wesentlichen von der Akkretionsrate  $\dot{M}$  ab. In einer Entfernung zur Protosonne von unter 0,5 AU, liegt bei einer Akkretionsrate von bis zu  $\dot{M} = 10^{-7} M_\odot$  der maximale Umschlagpunkt von einer "Standard Akkretionsscheibe" (SAD) zu einer "Jet emittierenden Scheibe" (JED) (Combet & Ferreira, 2008). Mit der Wahl des Simulationsgebiets  $r > 0,5 \text{ AU}$  können Effekte dieser Art vernachlässigt werden, weshalb dies in der vorliegenden Arbeit so festgelegt wurde.

### Äußerer Rand - Übergang zur Einhüllenden

Durch die viskose Entwicklung der Scheibe breitet sich der äußere Scheibenradius langsam nach außen aus. Der äußere Radius  $R_D$  folgt dabei der Gleichung (Hersant et al., 2001):

$$\frac{dR_D}{dt} = \frac{3}{2} \frac{\nu}{R_D}, \quad (2.59)$$

wobei die Viskosität  $\nu$  über Gleichung 2.44 gegeben ist. Vereinfachend wird hier jedoch davon ausgegangen, dass die Scheibe nach Abschluss des Kollapses bereits voll ausgebildet, und  $R_D$  somit konstant ist.

### Scheibenatmosphäre

Eine wichtige Grenzfläche stellt auch die Scheibenatmosphäre dar, da über sie die thermische Kopplung mit dem ISM erfolgt. Die Atmosphäre beginnt bei einer Höhe über der Mittelebene  $z_s$ , von der Strahlung frei in den Weltraum entweichen kann. Sie wird meist bei einem Wert von  $\tau(z_s) = 2/3$  angenommen (Makalkin & Dorofeeva, 2009). Die optische Tiefe  $\tau$  berechnet sich dabei durch vertikale Integration:

$$\tau = \int_{z_s}^{\infty} \kappa_R \rho(r, z) dz, \quad (2.60)$$

wobei  $\kappa_R$  die Rosseland Opazität des Mediums ist. Gewöhnlich liegt  $z_s$  zwischen der zwei- und dreifachen Skalenhöhe  $h_g$ . Oberhalb dieser Zone liegt ein photodominierter

Bereich vor, der von Ionen und atomaren Stoffen geprägt ist, während unterhalb von  $z_s$  molekulare Verbindungen bestehen können (siehe Abschnitt 2.1.4). Da gleichzeitig die Stoffdichten in dieser Region sehr gering werden, und damit wenig zur Hauptmasse der Scheibe beitragen, wird hier der Bereich oberhalb von  $z_s$  vernachlässigt.

#### 2.4.4. Chemie während der Scheibenphase

Die Dichtefelder  $\rho_g, \rho_d$  werden durch die Gleichungen 2.47a bzw. 2.50 und die Geschwindigkeitsfelder  $v_g, v_d$  durch Gleichung 2.51 bzw. 2.56 initialisiert. Die Parameter der Funktionen werden durch einen Fit an das Profil des Endzustands des Kollaps  $\rho|_{t=t_d}$  ermittelt. Im Folgenden werden die Gleichungen 2.48a, 2.48b numerisch gelöst (siehe Appendix A für die sich aus ihnen ergebenden Differenzengleichungen).

Anschließend wird analog zu Abschnitt 2.3.2 mittels des Lagrange- Ansatzes die chemische Entwicklung innerhalb der Scheibe untersucht (siehe Abschnitt 3.4). Als chemische Anfangskonzentrationen dienen wiederum die Konzentrationen  $X_i(r)|_{t=t_C}$  der Kollapsphase.

## 3. Ergebnisse der chemischen Entwicklung im SN

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse aus den Simulationen der Modelle für die drei Phasen des SN aus Abschnitt 2 diskutiert. In Abschnitt 3.1 wird die Wasserverteilung im Wolkenkern beschrieben und seine Deuterierung untersucht. In Abschnitt 3.2 werden dieselben Untersuchungen für den Kollaps vorgenommen. Der letzte Abschnitt 3.3 beschreibt die Ermittlung der physikalischen Scheibenparameter aus dem Endzustand des Kollapsmodells.

### 3.1. Chemie des Wolkenkerns

Der Wolkenkern wird mit der atomaren Anfangsverteilung entsprechend Tabelle 2.3 initialisiert. Zusätzliche Parameter des physikalischen Modells (Abschnitt 2.2) sind in Tabelle 3.1 aufgelistet. Entsprechend der Beschreibung in Abschnitt 2.2.4 werden die chemischen Konzentrationen entlang des radialen Kernprofils berechnet, und deren zeitliche Entwicklung untersucht. Da die vorhandene UV-Strahlung des ISRF ein Kennzeichen des Sternentstehungsmodus <sup>1</sup> ist, wird in einem ersten Schritt eine Parameterstudie angefertigt um einen Überblick, über die Sensibilität der Ergebnisse, d.h. der unterschiedlichen Wasserkonzentrationen abhängig von der externen Strahlung, zu erhalten. Dafür wird das ISRF von 1 Habing um die Faktoren 2 bzw. 3 skaliert und die Auswirkung auf Staubtransport und Wassergehalt in der Wolke analysiert. Die Ergebnisse sind in Abschnitt 3.1.1 in den Abbildungen 3.1 bis 3.6 dargestellt und beschrieben. Diese Resultate sind weitgehend in Tornow et al. (2013b) veröffentlicht, wobei hier zudem die Auswirkungen einer veränderten Größenverteilung des Staubes nach Zubko et al. (2004) auf die chemische Zusammensetzung untersucht wurde. Wegen der größeren mittleren Stauboberfläche der Verteilung nach Zubko et al. (ebd.) konnte dort ein wesentlich höherer Gesamtwasseranteil als bei Verwendung einer MRN Verteilung (Mathis et al., 1977)

---

<sup>1</sup>Entstehung im Cluster oder isoliert (siehe Abschnitt 1.2)

Parameter	Einheit	Wert		
Anfangstemperatur	[K]	10		
Gesamtmasse	[ $M_{\odot}$ ]	1,046		
Radius Wolkenkern $R_W$	[AU]	10658		
Radius Einhüllende $R_{env}$	[AU]	15230		
Dichte im Zentrum des Wolkenkerns	[ $\text{kg m}^{-3}$ ]	$0,70724812 \times 10^{-15}$		
Dichte in der Einhüllenden $\rho_{env}$	[ $\text{kg m}^{-3}$ ]	$0,5312 \times 10^{-18}$		
Schallgeschwindigkeit (isothermal)	[ $\text{m s}^{-1}$ ]	$0,18890323 \times 10^3$		
Skalierungsfaktor des ISRF	[-]	1	2	3
Strahlungsdruck	$\times 10^{-13}$ [Pa]	0,397	0,793	1,19
CRP Strahlungsrate $\zeta$	[ $\text{s}^{-1}$ ] je $H_2$	$1,3 \times 10^{-17}$		
Dämpfung durch die Einhüllende bei $R_W$	[Av]	2,17		
Staub-Gas Verhältnis	[-]	0,01		
Massendichte Silikatstaub	[ $\text{g cm}^{-3}$ ]	3,5		
Massendichte Graphitstaub	[ $\text{g cm}^{-3}$ ]	2,24		
Silikat/Graphit Häufigkeit	[-]	1,12		
Elementares C/O Verhältnis	[-]	0,44		
Hauptsächliche Stauboberfläche	[-]	Olivin		
Größenverteilung des Staubes	[ $\mu\text{m}$ ]	MRN, $s \in [5 \times 10^{-3} \dots 0,25]$		

**Tabelle 3.1.:** Physikalische und chemische Parameter für die Initialisierung des Wolkenkerns.

festgestellt werden. Da der Schwerpunkt dieser Arbeit auf der Anwendung des beschriebenen Multi-Zustandsmodells des Solaren Nebels liegt, wird hier nicht näher auf die Unterschiede, die sich aus den beiden Staubmodellen ergeben, eingegangen. Desweiteren ist das zugrundeliegende Kollapsmodell bis jetzt nur für die Verwendung einer MRN Staubverteilung ausgelegt. Ein weiteres Ergebnis von Tornow et al. (2013b) ist, dass die Staubbewegung in der Einhüllenden bei den hier betrachteten Strahlungsfeldern  $\leq 3$  Habing nur unwesentlichen Einfluss auf den sich daraus ergebenden Wassergehalt des Wolkenkerns hat. Grund hierfür ist, dass sich durch Variation des äußeren Strahlungsfeldes die Staubkonzentration an der Außengrenze des Kerns, und damit die Abschirmung nur sehr langsam ändern. Für andere Moleküle, deren Reaktionsraten sensibler von Unterschieden im ISRF abhängen, kann eine Skalierung des Strahlungsfeldes entscheidend



sein und große Änderungen in den Konzentrationen bewirken (Kupper, 2014).

In Abschnitt 3.1.2 wird einer der in Abschnitt 3.1.1 beschriebenen Wolkenkerne bezüglich der genauen Träger der Deuterierung im Wasseranteil untersucht. Dieser Kern bildet später die Grundlage für die Initialisierung des sich direkt anschließenden Kollapsmodells. Nach einer Entwicklung über 6 Ma wird die Simulation des Kerns beendet, und die entstandenen radialen Konzentrationsprofile des kompletten Satzes an Spezies für die Initialisierung des Kollaps verwendet. Der berechnete chemische Endzustand der Wolkenphase bestimmt also die Anfangsverteilung der Spezies für die nachfolgende Kollapsphase.

### 3.1.1. Der Einfluss von Strahlung auf die Wasserproduktion im Wolkenkern

In den Abbildungen 3.1 und 3.2 ist die zeitliche Entwicklung des Wasseranteils innerhalb des Wolkenkerns über dessen Radius aufgetragen. Zu Beginn der Simulation zeigt sich zwischen 0...0,5 Ma eine Phase, in der starke Änderungen in der Konzentration aufgrund der künstlichen, elementaren Anfangsbedingungen auftreten. Die Eismäntel um die Staubkörner bilden sich nach der Initialisierung der Wolke innerhalb von 0,1 Ma aus (Abb. 3.2), in der Gasphase zeigen sich noch bis zu 0,5 Ma nach Simulationsbeginn starke Änderungen in der Häufigkeitsverteilung (Abb. 3.1). Damit stellt sich die radiale Verteilung des Wassers in der Staubphase wesentlich schneller auf die richtige Größenordnung ein, und ändert sich in der folgenden Zeitspanne bis 6 Ma auch nur noch um maximal 20%. Das gasförmige Wasser zeigt dagegen stärkere Änderungen während der Lebensdauer der Wolke. Es ist jedoch aufgrund seiner geringen Konzentration von  $< 10^{-9}$  relativ zu gesamt  $H$  für den Kern nur von untergeordneter Bedeutung. Die schnellere Anpassung der Konzentration von Wassereis auf der Stauroberfläche an die Größenordnung im Endzustand der Wolke ist realistisch, da bekannt ist, dass der Staub in den kalten Umgebungen der Wolkenkerne für einen Großteil der Molekülbildung verantwortlich ist (Katz et al., 1999).

Nach der ersten Einschwingphase erkennt man insbesondere in der Gasphase noch Änderungen des radialen Profils der Wasserverteilung über die gesamte Simulationsdauer. Dies gilt insbesondere für die inneren Bereiche, die, bedingt durch ihre bessere Abschirmung vom ISRF und den demzufolge niedrigeren Temperaturen, eine höhere chemische Anpassungszeitskala  $\tau_{chem}$  besitzen.

Für Wasser, wie für viele nicht dargestellte Spezies, existiert eine gewisse radiale Übergangszone, ab der sich eine qualitative Änderung der Konzentration zeigt. Die Übergangszone wird mit zunehmender äußerer Bestrahlung breiter, wobei der Gradient

des sich radial ändernden Konzentrationsverlaufs schwächer wird. Dies gilt sowohl für Wasser in der Gas- als auch in der Eisphase.

Die Existenz einer Übergangszone hängt mit der Abschirmung des Kerns gegen die einfallende, hochenergetische UV-Strahlung zusammen. Für Wasser liegt dieser Bereich bei ca. 5 – 7 kAU, was einer Abschirmung von  $A_V \approx 5,2 - 7,7$  Magnituden entspricht (siehe Abbildung 3.3). Innerhalb dieser Zone ist Wasserdampf vorhanden, während er in den äußeren Bereichen der Wolke durch die einfallende Strahlung dissoziiert. Auch in der Eisphase (Abb. 3.2) ist dieser Übergang zu erkennen, wenn auch wesentlich schwächer ausgeprägt. Hier zeigt sich eine höhere Konzentration an Wassereis außerhalb der Übergangsregion. Ein Grund hierfür könnte wiederum in der eintreffenden Strahlung liegen, die über die Dissoziation von Spezies stets genügend Reaktionspartner für die neuerliche Bildung von Wassereis auf der Oberfläche des Staubes zur Verfügung stellt. In den inneren Bereichen des Wolkenkerns steht die Wassersynthese auf der Stauboberfläche zudem stärker in Konkurrenz zu photosensitiveren Stoffen um den verfügbaren Sauerstoff, sodass die Wasserkonzentration der Eisphase hier geringer ist. Durch die hohe Abschirmung des Kerns aufgrund der Einhüllenden ist die Wasserdessorption von der Stauboberfläche in den äußeren Bereichen zudem nicht effizient genug, um dessen Konzentration dort merklich zu reduzieren.

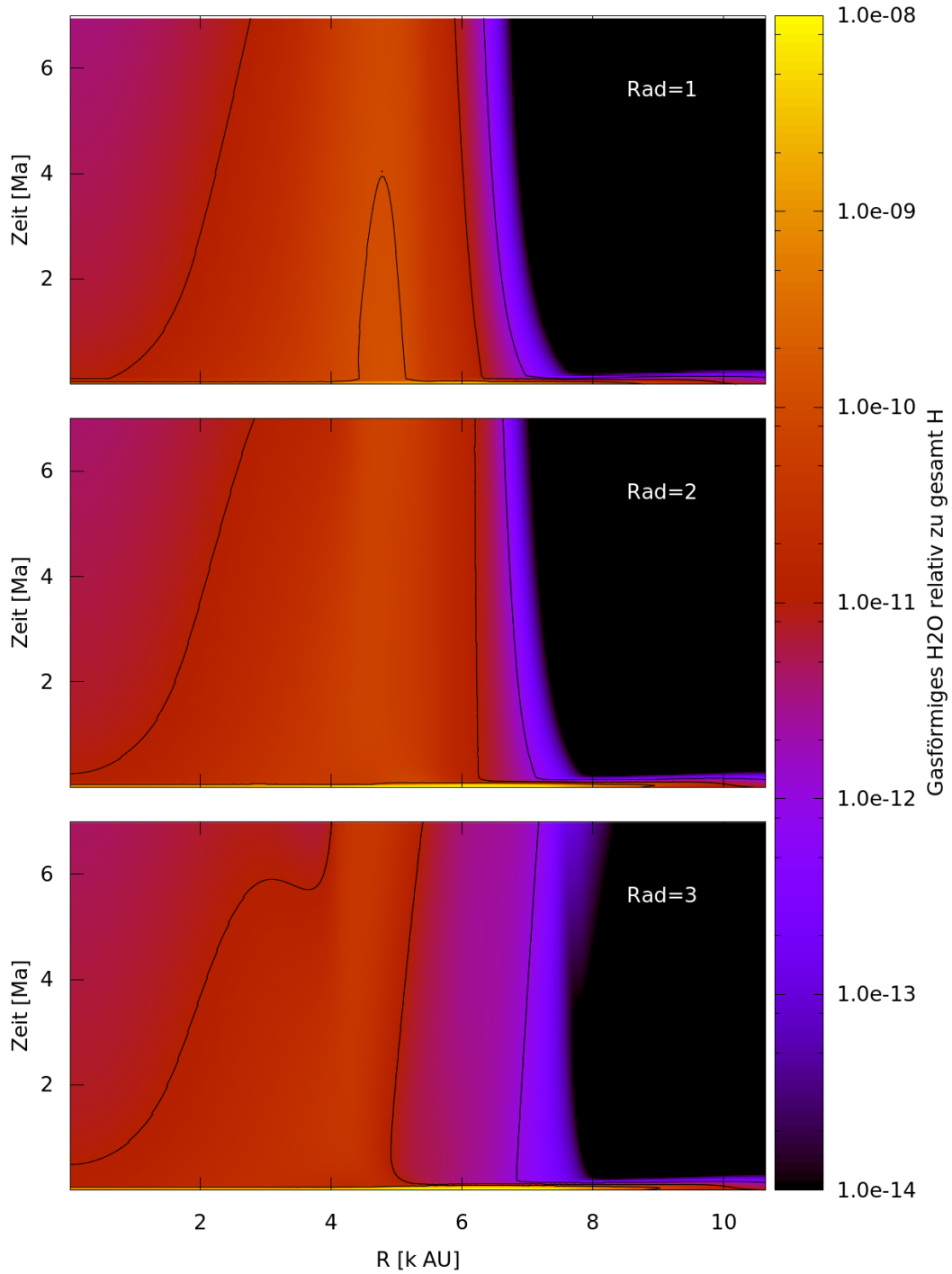
Insgesamt lässt sich feststellen, dass Wassereis die am stärksten vertretene Spezies im Eismantel des Staubes ist und im Vergleich zum ebenfalls häufig auftretenden Kohlenstoffmonoxid ein relatives Verhältnis  $X_{CO}/X_{H_2O}$  von maximal 0,13 aufweist. Wie man in Abbildung 3.5 erkennt, ist seine Gesamtkonzentration zum Ende der Simulation relativ gleichmäßig über den gesamten Wolkenkern verteilt. Den größten Anteil am Gesamtwassergehalt hat erwartungsgemäß das auf den Staubkörnern gespeicherte Wasser in der Eisphase.

Durch Integration der Gesamtwasserkonzentration über den Radius lässt sich das Gesamtgewicht des vorhandenen Wassers ermitteln:

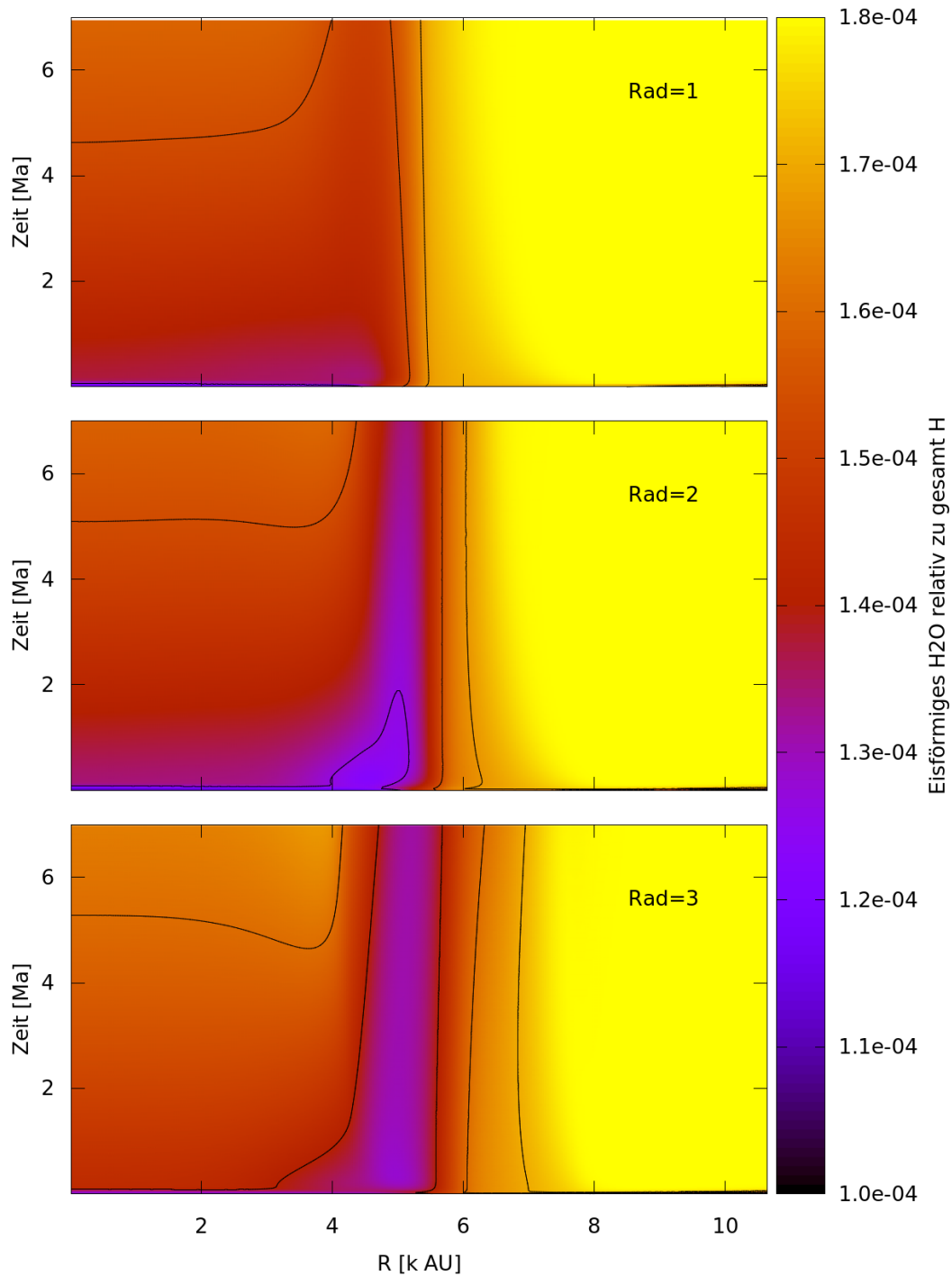
$$M_{tot.H_2O} = \int_0^{R_W} X_{tot.H_2O}(r) \rho_r r^2 dr \quad (3.1)$$

Der sich daraus ergebende Gesamtwassergehalt der drei untersuchten Wolkenkerne ändert sich bei Skalierung des ISFR, wie in Abbildung 3.4 und Tabelle 3.2 zu erkennen ist, nur unwesentlich.

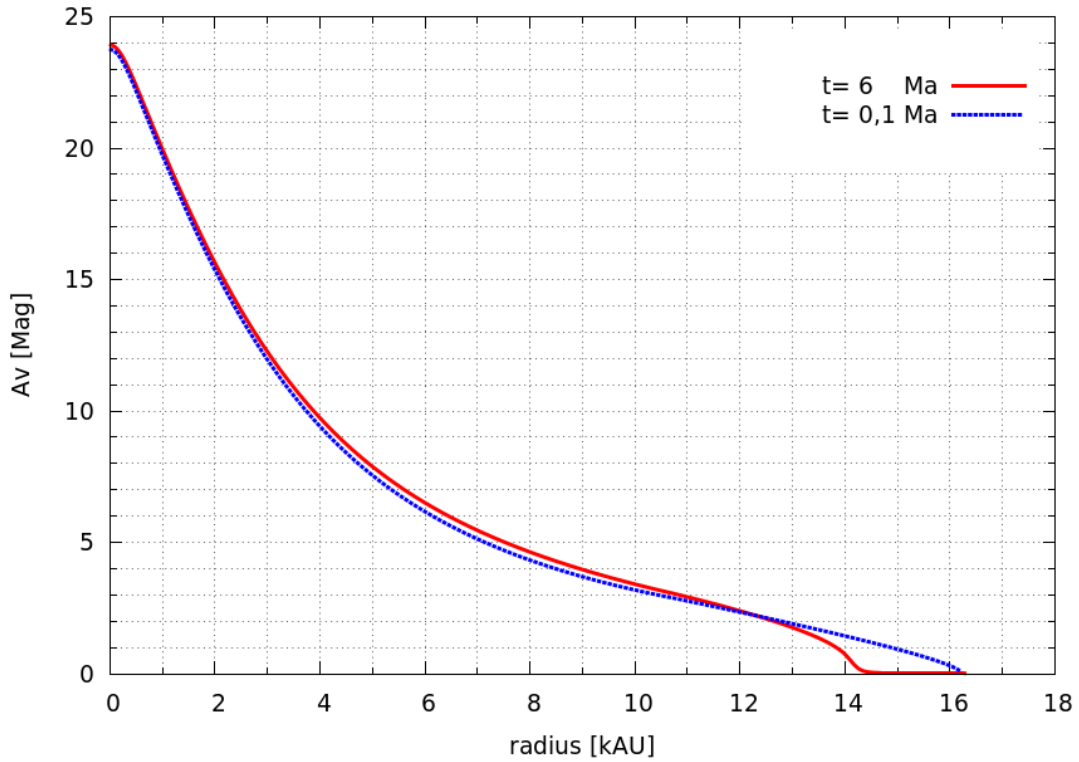
In Abbildung 3.6 ist das  $(D/H)_{H_2O}$  Verhältnis im Gesamtwasseranteil aufgetragen. Es zeigt ebenfalls nur wenig Änderungen bei Variation des ISRF. Für junge Wolkenkerne ( $t < 2$  Ma) beträgt das  $D/H$  Verhältnis im inneren Teil des Kerns ( $r < 5$  AU) in allen drei betrachteten Fällen ca.  $2,2 \times 10^{-2}$ . Mit zunehmendem Radius fällt es auf unter  $10^{-5}$



**Abb. 3.1.:** Dargestellt ist die zeitliche Änderung der radiale Verteilung von gasförmigem  $H_2O$  (relativ zu gesamt  $H$ ) im Wolkenkern in Abhängigkeit von der Entfernung zum Zentrum für drei verschiedene Strahlungsfelder von 1, 2 und 3 Habing. Es ist die zeitliche Entwicklung der Wasserkonzentration zwischen 0 und 7 Ma über der y-Achse aufgetragen. Isokonzentrationslinien sind für die Werte  $10^{-10}$ ;  $10^{-11}$  und  $10^{-12}$  ausgewiesen. Für alle Strahlungsfelder zeigt sich eine starke Übergangsregion von niedrigen  $X_{H_2O} < 10^{-14}$  zu höheren Konzentrationen  $X_{H_2O} > 10^{-11}$  im Bereich zwischen 5 und 7 kAU.



**Abb. 3.2.:** Zeitliche Änderung der radialen Verteilung für eisförmiges  $H_2O$  auf der Oberfläche des Staubes im Wolkenkern analog zu Abbildung 3.1. Isokonzentrationslinien sind für die Werte  $1,4 \times 10^{-4}$ ;  $1,6 \times 10^{-4}$  und  $1,7 \times 10^{-4}$  ausgewiesen. Im Gegensatz zu 3.1 ist die Konzentration jedoch nicht logarithmisch aufgetragen, da sie sich sowohl räumlich, als auch im Laufe der Zeit weniger stark ändert als das Wasser in der Gasphase.

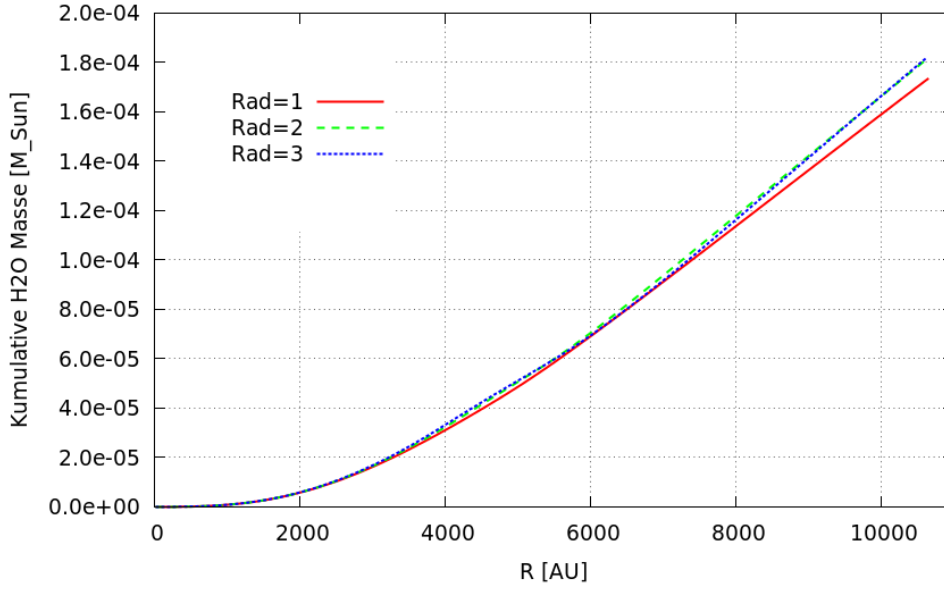


**Abb. 3.3.:** Abschirmung des Wolkenkerns aufgetragen über dem Radius für die Zeiten  $t = 0,1$  Ma (blaue Linie) und  $t = 6$  Ma (rote Linie). Der Kernradius  $R_W$  ist bei ca. 10 kAU durch eine vertikale, graue Linie markiert. Die Abschirmung innerhalb des Kerns ändert sich durch die Bewegung des Staubes in der Einhüllenden über die Simulationzeit nur unwesentlich.

in den äußeren Bereichen ab. Mit fortschreitender Simulationsdauer reduziert sich das  $D/H$  Verhältnis im Inneren des Kerns langsam auf einen Wert unter  $1,8 \times 10^{-2}$ , während es in den äußeren Bereichen mit der Zeit leicht ansteigt, d.h. dort nimmt die Deuterierung mit der Zeit zu. Es verhält sich damit entgegengesetzt zum Gesamtwasseranteil, welcher in den inneren Regionen der Wolke im Laufe der Zeit leicht zunimmt.

### 3.1.2. Deuterierung des prästellaren Kerns

Es soll im Folgenden etwas detaillierter auf die spezifischen Träger der Deuterierung eingegangen werden, die für den Wolkenkern von Bedeutung sind. Die Verteilungen von  $HDO$  und  $D_2O$  in der Gasphase zeigen ein ähnliches raumzeitliches Verhalten wie  $H_2O$ . Jedoch unterscheiden sich die Konzentrationen im inneren Kernbereich um ca.  $X_{H_2O} \approx X_{HDO} \times 3 \cdot 10^3 \approx X_{D_2O} \times 10^4$  (siehe Abb. 3.7a und 3.7b). In der Übergangszone weisen beide deuterierten, gasförmigen Spezies ein Konzentrationsmaximum auf. Dort können folgende Werte erreicht werden:  $X_{H_2O} \approx X_{HDO} \times 2 \cdot 10^2 \approx X_{D_2O} \times 6 \cdot 10^3$ . Jen-



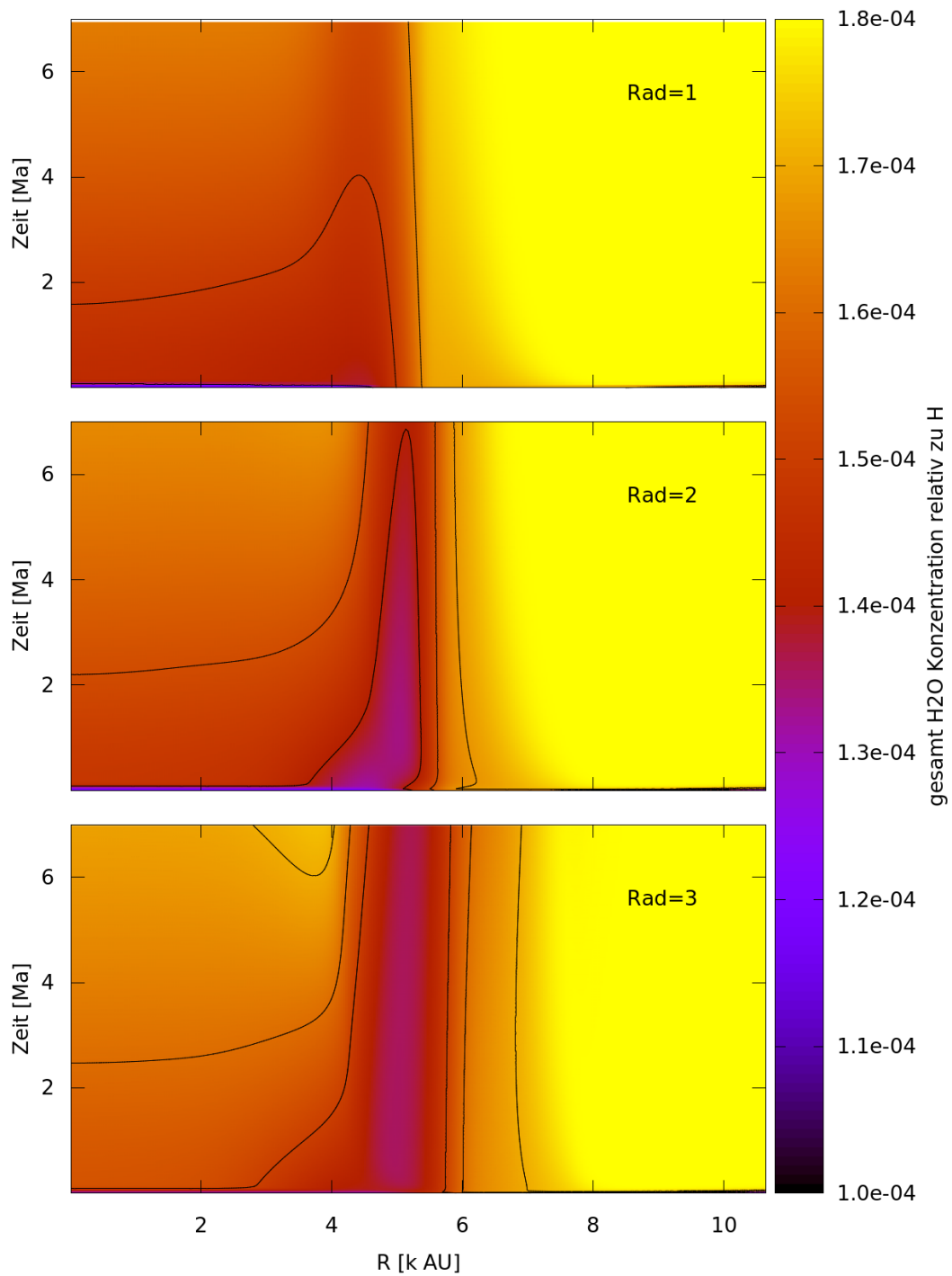
**Abb. 3.4.:** Kumulativer Gesamtwassergehalt des Wolkenkerns in Sonnenmassen bei einem äußeren Strahlungsfeld von 1, 2 und 3 Habing integriert über den Radius gemäß Gleichung 3.1. Es zeigen sich nur kleine Änderungen bei Variation des ISRF (vergl. auch Tabelle 3.2)

seits dieser Übergangszone fällt die Häufigkeit von gasförmigem  $D_2O$  allerdings sehr viel stärker ab als die von  $HDO$ . Auch hier zeigt sich also die Abnahme der Deuterierung des Wassers mit größer werdender Entfernung vom inneren Kern.

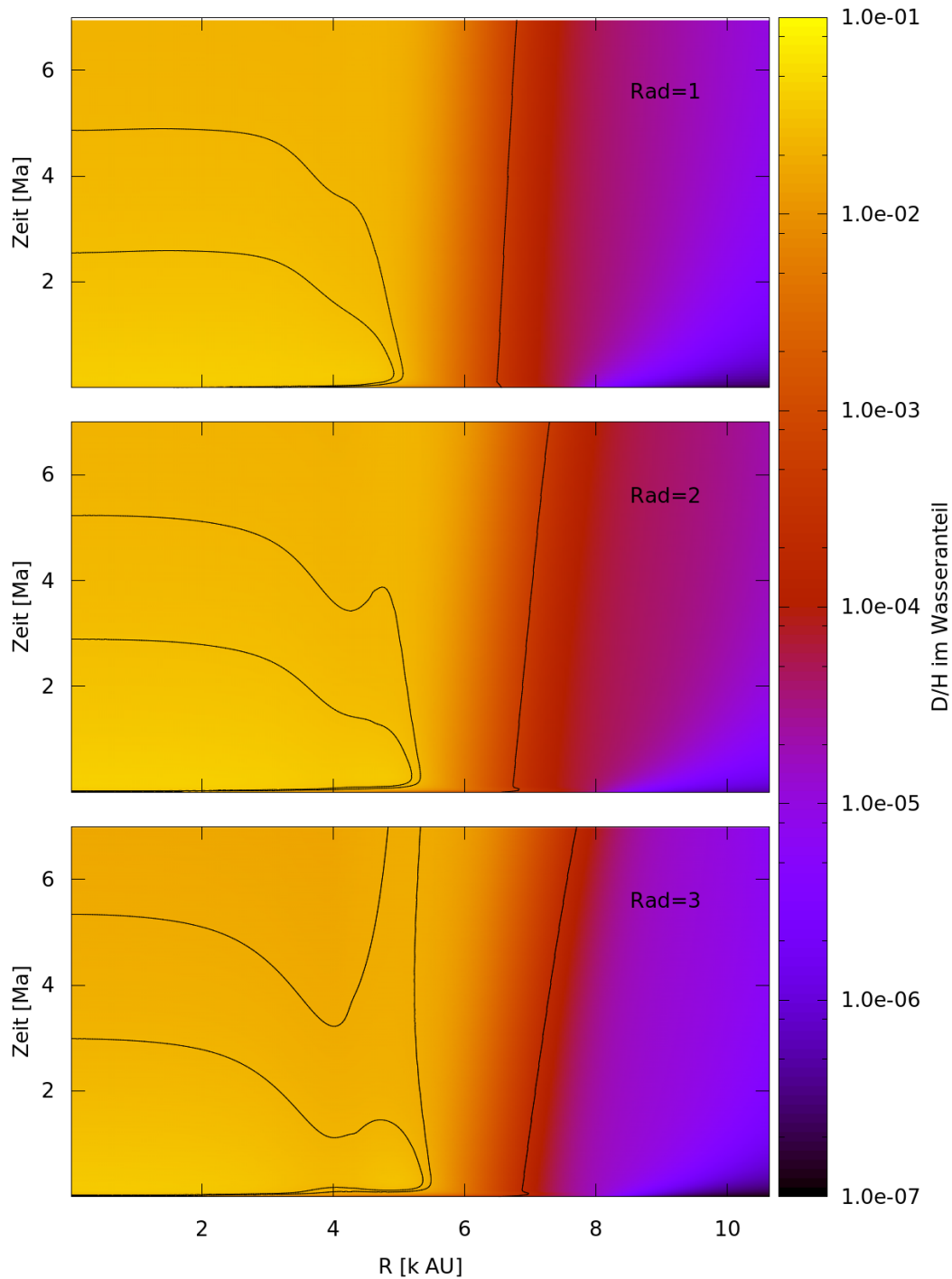
In der Eisphase ist  $X_{HDO} \lesssim 6 \cdot 10^{-2} \times X_{H_2O}$  im gesamten Wolkenkern (Abb. 3.7c). Das Maximalverhältnis  $X_{HDO}/X_{H_2O}$  liegt dabei im inneren Bereich vor, und wird dort im Laufe der Simulation von  $\approx 6 \cdot 10^{-2}$  auf  $\approx 3.5 \cdot 10^{-2}$  reduziert. Im Vergleich dazu ist im gesamten Wolkenkern  $X_{D_2O} \lesssim X_{H_2O} \times 1,2 \cdot 10^{-4}$  in der Eisphase (s. Abb. 3.7d), und damit ungefähr im selben Verhältnis vorhanden wie in der Gasphase. Dagegen ist eisförmiges  $X_{D_2O}$  um mindestens zwei Größenordnungen weniger häufig als eisförmiges

Strahlungsfeld des unter- suchten Kerns [Habing]	Gesamtwasseranteil $\times 10^{-3} [M_\odot]$
Rad = 1	0,1732
Rad = 2	0,1815
Rad = 3	0,1822

**Tabelle 3.2.:** Gesamtwassergehalt der berechneten Wolkenkerne in Sonnenmassen in Abhängigkeit vom äußeren Strahlungsfeld. Der Gesamtwassergehalt ändert sich nur unwesentlich bei einer Skalierung des ISRF.

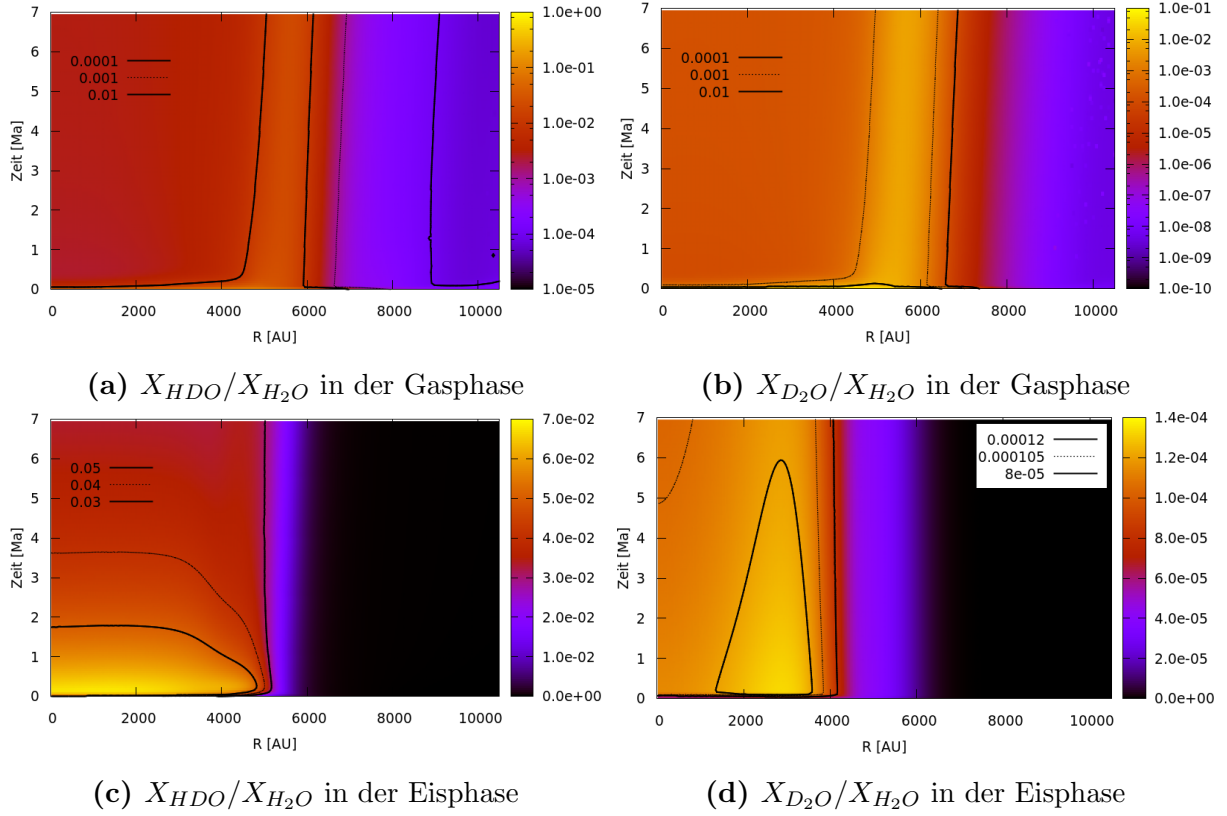


**Abb. 3.5.:** Relativer Gesamtwassergehalt der Gas- und Staubphase. Die Verteilung wird klar von der um Größenordnungen höheren Wasserkonzentration in der Eisphase (s. Abb. 3.2) bestimmt. Isokonzentrationslinien sind für die Werte  $1,5 \times 10^{-4}$ ;  $1,6 \times 10^{-4}$  und  $1,7 \times 10^{-4}$  eingezeichnet.



**Abb. 3.6.:** Zeitliche Änderung des  $D/H$  Verhältnisses im Gesamtwasseranteil des Wolkenmaterials. Das  $D/H$  Verhältnis verringert sich mit zunehmendem Abstand vom Zentrum. Mit fortschreitender Simulationsdauer nimmt die Deuterierung des Wassers im inneren Kernbereich ab, wohingegen sie in den äußeren Regionen der Wolke im Laufe der Entwicklungszeit leicht zunimmt. Es sind die Isokonzentrationslinien der Werte  $2,2 \times 10^{-2}$ ;  $1,8 \times 10^{-2}$  und  $2 \times 10^{-4}$  eingetragen.





**Abb. 3.7.:** Vergleich der zeitlichen Entwicklung der gasförmigen Konzentrationen bei einem Strahlungsfeld von 2 Habing. Abgebildet sind die Konzentrationen von  $HDO$  (a) und  $D_2O$  (b) und die der auskondensierten Spezies  $HDO$  (c) und  $D_2O$  (d) jeweils relativ zu  $H_2O$  in der entsprechenden Phase.

$X_{HDO}$ . Die Häufigkeit von  $D_2O$  in der Eisphase nimmt radial bis ca. 6000 AU nochmals um mehrere Größenordnungen auf  $\ll 10^{-5}$  ab. Der Übergangsbereich, in dem sich die Konzentration von eisförmigem  $D_2O$  am stärksten ändert, liegt bei ca. 4000 AU und befindet sich damit noch dichter am Zentrum als es bei den übrigen Spezies der Fall ist. Seine Position ändert sich zeitlich kaum. In den Abbildungen 3.19 ist außerdem zu erkennen, dass die Übergangszonen der beiden deuterierten, gasförmigen Spezies etwas weiter außen beginnen als die der kondensierten Varianten von Wasser.

Der Grund für die nach außen stark abnehmende Deuterierung liegt in den unterschiedlichen Formationsprozessen von Wasser im Vergleich zu seinen deuterierten Formen. Wie in den Reaktionsgleichungen 2.18 in Abschnitt 2.1.1 beschrieben, findet die Deuterium Fraktionierung hauptsächlich über molekularen Sauerstoff bzw. Ozon statt. Diese mehratomigen Sauerstoffkonfigurationen werden leichter durch energetische Photonen dissoziiert, während  $H_2O$  auf der Stauboberfläche auch aus atomaren Edukten produziert werden kann. Dementsprechend ergibt sich eine höhere Konzentration von Wassereis in den Außenbereichen des Wolkenkerns (Abb. 3.2), während das  $D/H$  Verhältnis in den

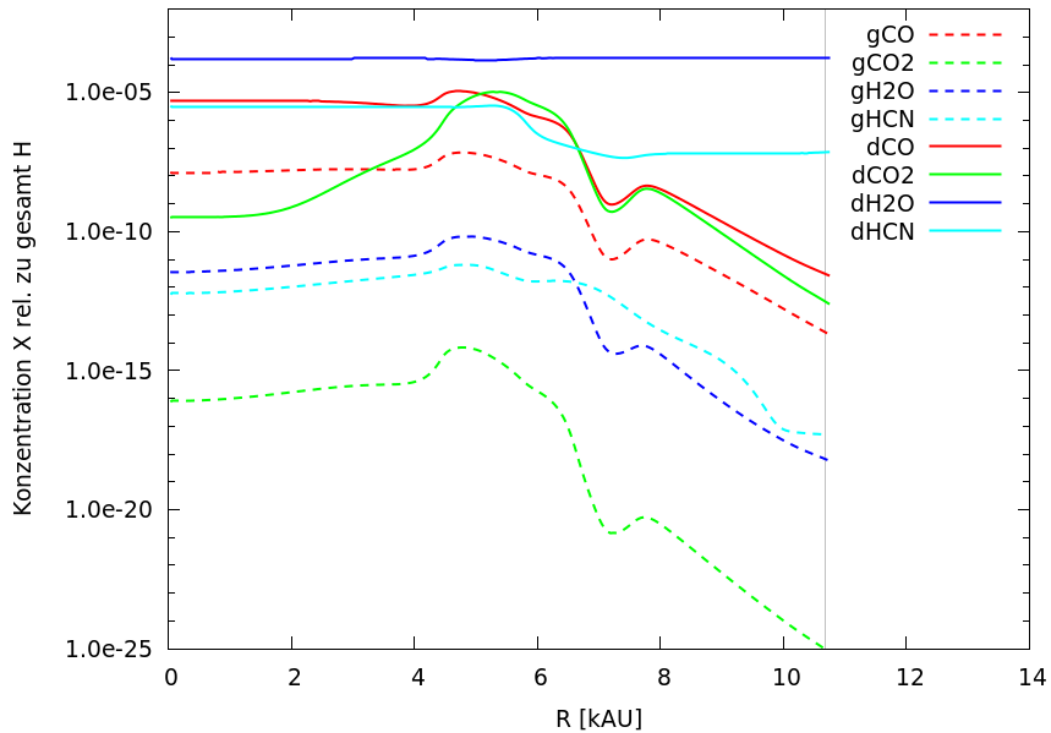
stärker abgeschirmten Regionen höher ist (Abb. 3.6). Dies gilt insbesondere für  $D_2O$ , da die Wahrscheinlichkeit für eine Doppeldeuterierung zusätzlich reduziert ist.

### 3.1.3. Chemische Verteilung am Ende der Wolkenphase

In Abbildung 3.8 sind die Konzentrationen einiger bedeutender Spezies zum Simulationsende  $X_i(r)|_{t=t_W} = 6 \text{ Ma}$  dargestellt. Die radiale Verteilung des gesamten Satzes an chemischen Verbindungen bildet im Folgenden die Anfangsbedingung für die Kollapsphase. Alle dargestellten höheren Moleküle zeigen auch zu diesem Zeitpunkt im Bereich von ca. 6000 AU erhöhte Konzentrationen. In diesem Übergangsbereich liegt eine Abschirmung durch die Einhüllende und das umgebende Material von  $A_v \approx 6,5$  Magnituden vor. Analog zur Molekularen Lage im äußeren Scheibenbereich (siehe Abschnitt 2.1.4) scheint diese Zone besonders günstig für chemische Molekülbildung zu sein, da sie einerseits ausreichend abgeschirmt von dissozierender Strahlung, andererseits jedoch aktiv genug ist um Reaktionen zu ermöglichen. Wie in Abbildung 3.8 außerdem zu erkennen, ist bis zur Übergangszone zwischen 5 – 7 AU im Allgemeinen kaum eine radiale Änderung der relativen Häufigkeiten der Spezies vorhanden. Jenseits der Übergangszone nehmen die Konzentrationen der meisten Verbindungen durch die Einwirkung des IS-RF zur Einhüllenden der Wolke hin ab. Wie im nächsten Abschnitt gezeigt wird, ist es allerdings der Bereich der Übergangszone, der nach der Kontraktion der Wolke die chemischen Bedingungen für die Scheibenphase bestimmt. Der innere Bereich des Kerns wird fast ausnahmslos in den sich bildenden Protostern aufgenommen, und nimmt auf diese Weise nur noch indirekt an der späteren Scheibenchemie teil. Vergleicht man die Konzentrationen der angegebenen Spezies in der Übergangszone mit den in Kometen gemessenen Werten, ergibt sich ein gemischtes Bild. Zwar ist Wassereis hier wie auch in Kometen die dominierende Spezies, und die Verhältnisse von  $(X_{CO}/X_{H_2O}) \approx 5\%$  und  $(X_{CO_2}/X_{H_2O}) \approx 6\%$  sind mit den Beobachtungen kompatibel, jedoch ist  $(X_{HCN}/X_{H_2O})$  mit ebenfalls 2% etwas höher als die Messungen erwarten lassen (Mumma & Charnley, 2011).

## 3.2. Chemie in der Kollapsphase

Ausgehend von den chemischen Konzentrationen, wie sie nach dem Ende der Wolkenphase vorliegen (Grafik 3.8), soll nun deren Entwicklung während der Kollapsphase untersucht werden. Mit der in Abschnitt 2.3.2 beschriebenen Prozedur werden die physikalischen Größen eines, sich mit dem Strömungsfeld der kollabierenden Wolke mitbewegenden Lagrange-Paketes, bestimmt. Die Größen entlang des sich daraus ergebenden Pfades



**Abb. 3.8.:** Chemischer Endzustand der Wolkenphase, wie er als Anfangsbedingung für die Kollapsphase dient. Dargestellt sind die Konzentrationen einiger relevanter Spezies, die sich für ein äußeres Strahlungsfeld von 2 Habing und MRN Staubprofil nach 6 Ma ergeben. Die durchgezogenen Linien stehen für auskondensierte Spezies in der Eisphase (vorangestelltes *d*), die gestrichelten beschreiben die gasförmige Phase (vorangestelltes *g*).

bilden die Eingangsparameter für die Bestimmung der chemischen Entwicklung während der Kollapsphase. Weitere wichtige physikalische Modellparameter sind in Tabelle 3.3 zusammengetragen.

Parameter	Wert
Zielmasse des Protosterns [ $M_{\odot}$ ]	0,98
Anfangsmagnetisierung der Wolke [ $\mu G$ ]	25

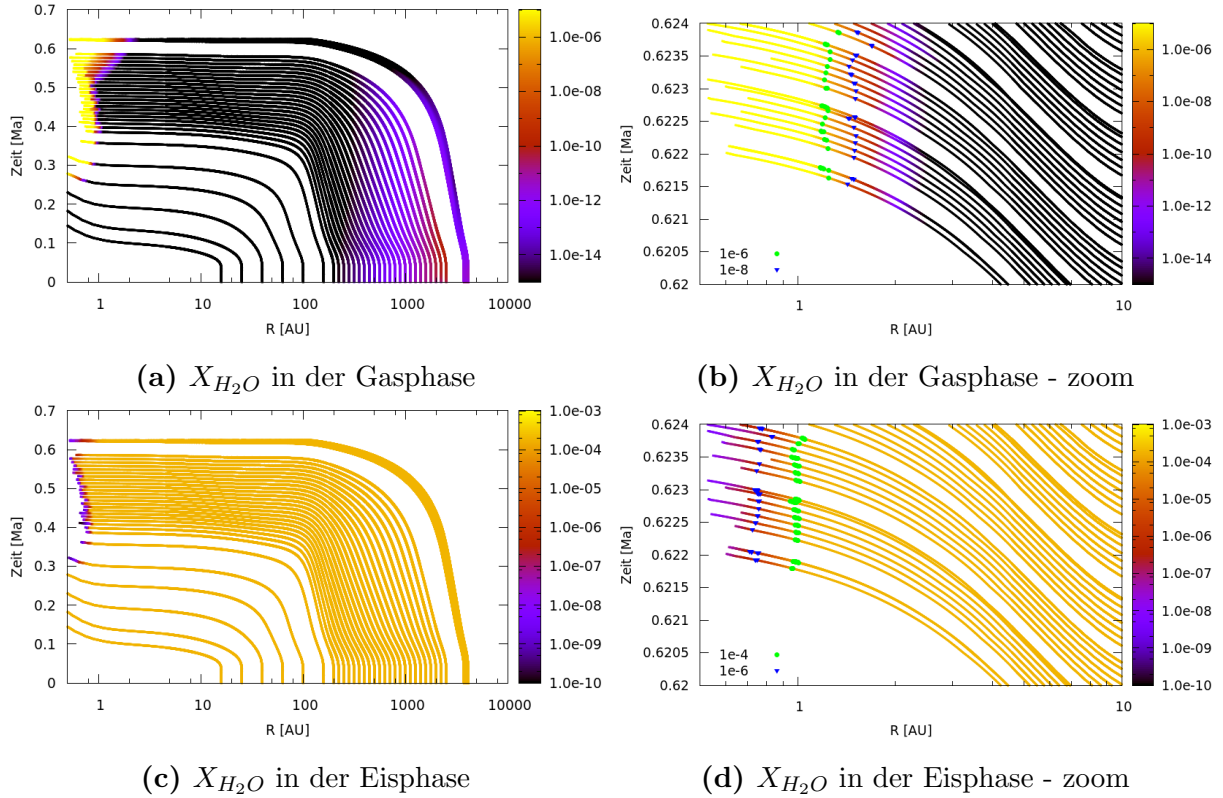
**Tabelle 3.3.:** Freie Parameter des Kollapsmodells. Alle anderen Größen sind abgeleitet aus dem Anfangsprofil der Initialisierung oder werden über die Minimierungsbedingung 2.39 bestimmt.

### 3.2.1. Entwicklung der Wasserverteilung in der Kollapsphase

Da aus den chemischen Verteilungen der Spezies entlang der Lagrange-Pfade die chemischen Profile im Ortsraum interpoliert werden, ist die Wahl der initialen Positionen der Lagrange-Pakete von entscheidender Bedeutung, um eine ausreichende Auflösung der interessanten Regionen zu gewährleisten. Wie schon in Abbildung 2.4 zu sehen, wurden die Anfangspositionen der Lagrange-Pakete derart gewählt, dass sie gegen Ende des Kollaps in der vermuteten Entstehungsregion der inneren Planeten terminieren. Der für die Initialisierung der Scheibenphase bedeutsame Bereich liegt hierbei zwischen  $r \in [0,5 \dots 120]$  AU, und damit in einem Bereich zwischen der JED Zone (siehe Abschnitt 2.4.3) und dem äußersten zentrifugalen Radius der Scheibe. Anfangspositionen, die dieses Kriterium erfüllen und in die genannte Endposition münden, liegen zwischen  $r \in [3819 \dots 4125]$  AU. Diese Region zeigt gewisse Überschneidungen mit der Übergangszone des Wolkenkerns, in der die stärksten radialen Gradienten der chemischen Konzentrationen vorliegen.

Zu Beginn der Kollapsphase bestehen noch weitgehend die Konzentrationen, welche sich in der Wolkenphase ausgeprägt haben (siehe Abbildung 3.9a bzw. 3.9c). Je nach der radialen Anfangsposition der Teilchen erfahren diese während ihres Weges Richtung Zentrum mehr oder weniger starke Änderungen der physikalischen Umgebungsparameter (Abschnitt 2.1.3). Der Eintritt der Lagrange-Pakete in die Hot-Corino Region ist an der beginnenden Desorption des Wassereises in die Gasphase zu erkennen. In Abbildung 3.9a ist dies bereits nach ca. 0,28 Ma bei 0,9 AU nahe des Zentrums zu sehen. Die Corino Region breitet sich mit zunehmender Simulationsdauer bis zum Ende des Kollaps leicht auf ca. 1,4 AU aus. Der Bereich, in dem sowohl gasförmiges als auch eisförmiges Wasser vorliegt, ist je nach Wahl des Grenzwertes, ab dem die Konzentrationen signifikant werden, bis zu 1 AU breit. Legt man einen relativen Konzentrationswert von  $10^{-6}$  zugrunde, befindet sich dieser Bereich zwischen ca.  $[0,75 \dots 1,4]$  AU (siehe Isokonzentrationsverläufe in Abbildung 3.9b und 3.9d). In der Scheibenphase kann die Ausdehnung dieses Bereichs durch die vertikale Variation der physikalischen Parameter, und demzufolge die der chemischen Konzentrationen, auch mehrere AU betragen (Dodson-Robinson et al., 2009; Min et al., 2011). In dieser Region liegt eine Temperatur von  $T > 150$  K vor. Hier beginnt der Bereich, in dem der zweite bekannte Prozess zur Entstehung von gasförmigem Wasser neben der Desorption von Wassereis möglich wird, nämlich dessen Synthese durch Neutral-Neutral Reaktionen (Kupper et al., 2012). Falls das in der Corino Region über Neutral-Neutral Reaktionen gebildete Wasser einen signifikanten Beitrag zum Gesamtwassergehalt liefert, müsste sich dies in einem Abfall des  $D/H$  Wertes bemerkbar machen, da so entstandenes Wasser ein geringeres  $D/H$  Verhältnis aufweist, als das in der Eisphase entstandene (siehe Abbildung 3.10). Da dies

jedoch nicht der Fall ist, kann geschlussfolgert werden, dass der Großteil des Wassers im Bereich  $r > 0,9$  AU seinen Ursprung aus Zeiten der Wolkenphase hat. Für die Erdentstehung würde dies bedeuten, dass hauptsächlich hochdeutერიertes Wasser aus dem Wolkenkern zur Verfügung stand. Für die Entstehung von Merkur in einer Region dichter am Scheibenzentrum, könnte dagegen Wasser aus Gasreaktionen durchaus eine Rolle gespielt haben. Dieses Ergebnis würde das Szenario einer feuchten Akkretion der inneren Planeten unterstützen (siehe Abschnitt 1.4).



**Abb. 3.9.:** Konzentration von gasförmigem Wasser (oben) und gebundenem, eisförmigem Wasser (unten). Die Abbildungen der rechten Seite sind eine Ausschnittvergrößerung des Bereichs  $R \in [0,5 \dots 10]$  AU bzw. der Zeit  $t \in [0,62 \dots 0,624]$  Ma. In den Vergrößerungen sind zudem die Isokonzentrationsverläufe mit den in der Grafik unten links angegebenen Konzentrationen durch Kreuze dargestellt. Bei  $R \approx 1,4$  AU beginnt die Desorption des Wassers in die Gasphase.

Ein weiteres interessantes Ergebnis ist das Auftreten gewisser Oszillationen im Verhältnis von deuteriertem zu nicht-deuteriertem Wasser der Gasphase (siehe Abbildung 3.10). Die einfallenden Gaspakete zeigen weit vor Eintritt in die Corino Region  $\lesssim 10$  AU einen Abfall im  $\left(\frac{HDO}{H_2O}\right)$  bzw.  $\left(\frac{D_2O}{H_2O}\right)$  Verhältnis um ungefähr eine Größenordnung. Kurz darauf folgt bei ca.  $\approx 5$  AU wiederum ein Anstieg der Deuterierung über das ursprüngliche Deuterierungsniveau auf einen Maximalwert von  $\left(\frac{HDO}{H_2O}\right) \leq 0,5$  bzw.  $\left(\frac{D_2O}{H_2O}\right) \leq 0,03$ .

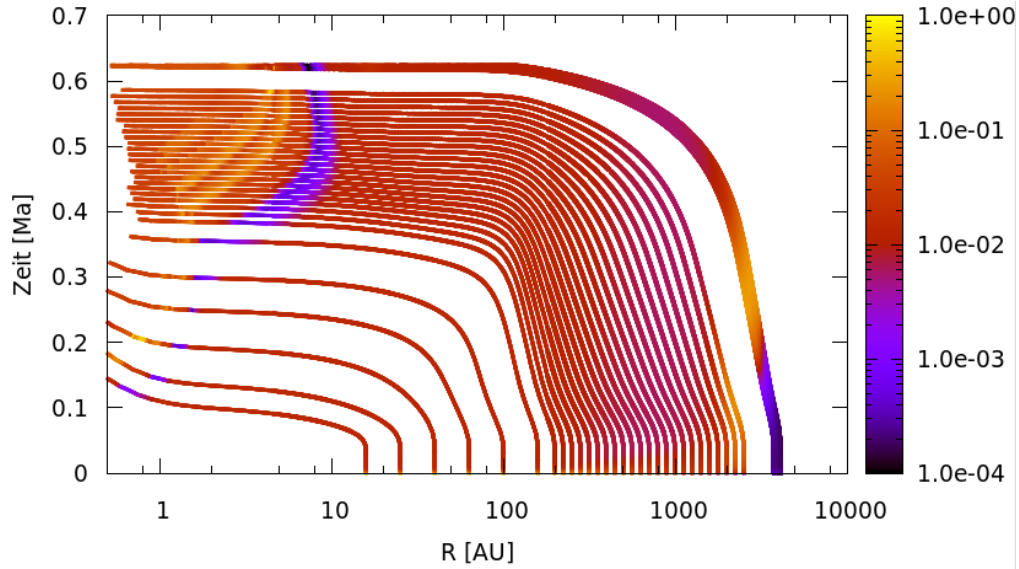
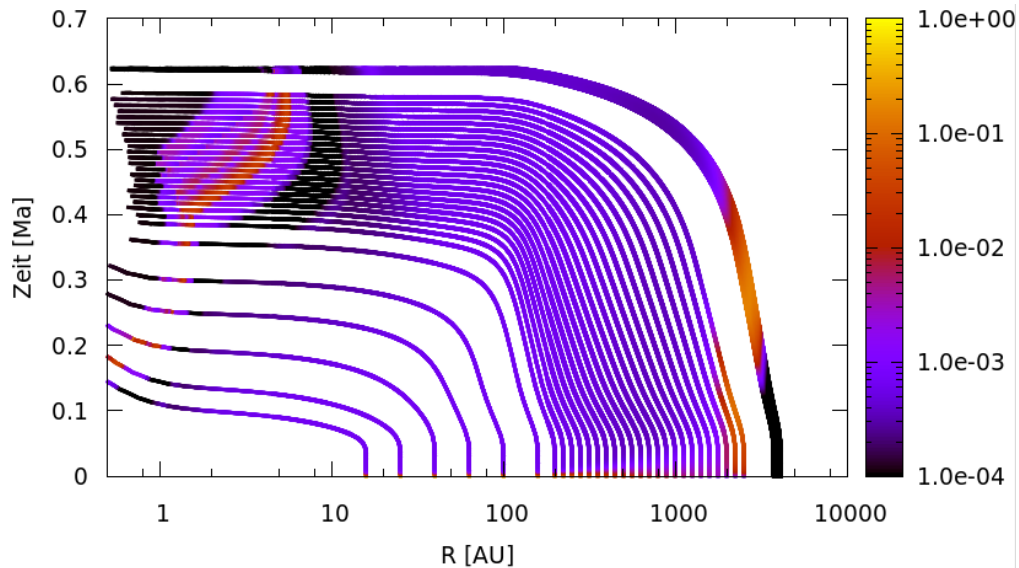
Die Regionen, in denen diese Schwankungen auftreten, korrespondieren dabei grob mit den Evaporationszonen der supervolatilen Stoffe  $CO$  und  $CO_2$  bzw.  $CH_4$  (vergleiche auch Abbildung 3.12). Insgesamt wird also in einem relativ kleinen Gebiet von wenigen Astronomischen Einheiten ein Unterschied in den Verhältnissen von bis zu 2,5 Größenordnungen durchlaufen. Da die Eisphase keine derartigen Oszillationen zeigt, kann der Grund kaum an einer differentiellen Diffusion von Wasser in die Gasphase liegen. Stattdessen wird vermutet, dass einfache, deuterierte alkoholische Kohlenstoffverbindungen für diese Schwankungen verantwortlich sind, wenn sie von der Staub- in die Gasphase eintreten, dort dissoziieren und damit die Bausteine für die Bildung von gasförmigem Wasser liefern.

Es sei bemerkt, dass in der Region, in der sich diese Vorgänge abspielen, gasförmiges  $H_2O$  eine Konzentration von unter  $10^{-12}$  relativ zu  $H$  besitzt, und so auch kleine Schwankungen in der Desorption der eisförmigen Spezies starke Auswirkungen auf die Konzentrationen in der Gasphase haben können.

In Abbildung 3.11 ist die zeitliche Änderung in der Deuterierung des Gesamtwasseranteils dargestellt. Es zeigen sich weder radiale noch zeitliche Änderungen für Lagrange-Pfade mit Startpositionen innerhalb von 2500 AU. Für Gaspakete, deren Quellregion in noch weiterer Entfernung vom Zentrum liegt, reduziert sich das  $D/H$  Verhältnis zunächst auf  $10^{-4}$ , um während der nach innen gerichteten Migration auf einen gemeinsamen Endwert von 0,025 anzusteigen.

Abbildung 3.12 zeigt die aus den Endpositionen der Lagrange-Pakete ermittelten radialen Konzentrationsverläufe zum Ende des Kollaps. Wie zu erwarten dominieren die unterschiedlichen Desorptionstemperaturen der Stoffe deren radiale Verteilung:  $CO$  als sehr volatiler Stoff ist nur in Bereichen außerhalb von 8 AU in signifikantem Maße auskondensiert. Innerhalb dieser Region fällt seine Konzentration in der Eisphase zum Zentrum hin schnell ab. Ähnlich verhält es sich entsprechend ihrer Volatilität mit den Stoffen  $HCN$  und  $H_2O$ , die bei  $r \approx 3$  AU bzw.  $r \approx 1$  AU desorbieren. Bevor die Konzentration von eisförmigem  $CO_2$  in Richtung Scheibenzentrum abnimmt, zeigt sich vor dem Abfall in einem Bereich zwischen 3 – 8 AU ein leichter Anstieg auf ein Plateau mit einer Konzentration von  $10^{-8}$  relativ zu  $H$ . Da dieser Anstieg in der Konzentration gleichzeitig mit dem Abfall von eisförmigem  $CO$  erfolgt, ist anzunehmen, dass sich ein Teil des verdampfenden  $CO$  durch Aufnahme von  $O$  zu  $CO_2$  umwandelt und erneut rekondensiert. Da der meiste Sauerstoff jedoch in  $H_2O$  gebunden ist, ist dieser Vorgang limitiert.

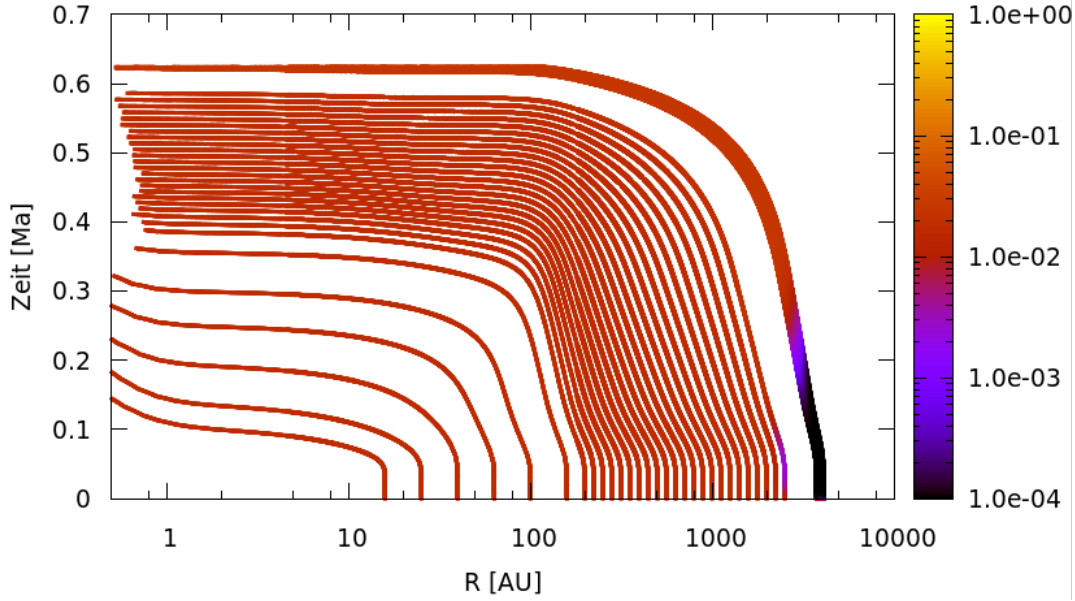
Wegen der sich im Laufe des Kollaps stärker ausbildenden radialen Temperatur- und Druckgradienten, sind die Variationen in den Konzentrationen ausgeprägter als im Falle des Wolkenkerns (vergleiche Abbildung 3.12 und 3.8). Beim Vergleich mit Beobachtun-

(a)  $X_{HDO}/X_{H_2O}$  in der Gasphase(b)  $X_{D_2O}/X_{H_2O}$  in der Gasphase

**Abb. 3.10.:** Konzentrationsverhältnisse der deuterierten Spezies von gasförmigem Wasser. Es zeigen sich Oszillationen in Regionen innerhalb von 10 AU, die vermutlich durch Evaporation von deuterierten, einfachen alkoholischen Kohlenstoffverbindungen hervorgerufen werden, wenn diese in die Gasphase eintreten, dissoziieren und für die Bildung von gasförmigem Wasser zur Verfügung stehen.

Im Gegensatz dazu ist beim Eintritt in die Corino Desorptionsregion des Wassers ( $r < 1,4$  AU) zum Ende der Kollapsphase ( $t > 0,6$  Ma) (vergleiche dazu Abbildung 3.9) keine Änderung im  $D/H$  Verhältnis zu erkennen. Hier zeigt sich, dass die Bildung von Wasser über Neutral-Neutral Reaktionen noch nicht maßgeblich eingesetzt hat, da diese das  $D/H$  Verhältnis reduzieren würden.





**Abb. 3.11.:** Zeitliche Entwicklung des  $D/H$  Verhältnisses im Gesamtwasseranteil während der Kollapsphase. Nach 0.3 Ma stellt sich in der gesamten Kollapsregion ein einheitlicher Wert von 0,025 ein (siehe auch Abbildung 3.12b).

gen an Kometen zeigt sich, dass das hier für einen Radius von 10 AU in der Eisphase bestimmte Verhältnis  $X_{HCN}/X_{H_2O}$  mit  $\approx 1,8\%$  genau wie im Wolkenkern erhöht ist (Mumma & Charnley, 2011). Kondensiertes  $CO$  bzw.  $CO_2$  ist im Verhältnis zu  $H_2O$  hier mit  $\approx 0,0014\%$  bzw.  $\approx 0,00028\%$  sehr viel weniger vorhanden als in der Wolkenphase.

### 3.3. Initialisierung der Scheibenphase

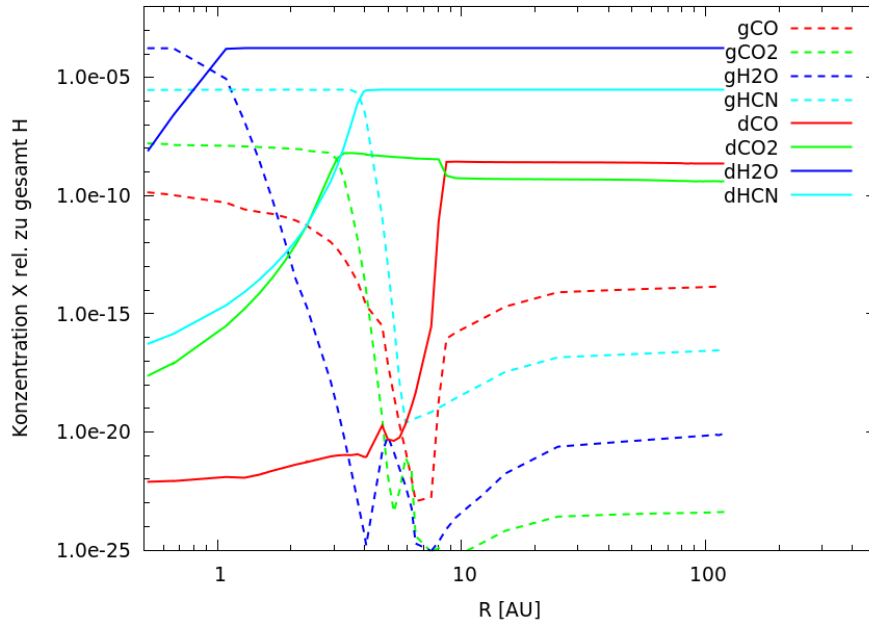
Bei dem in Abschnitt 2.3 präsentierten Kollapsmodell handelt es sich um ein kugelsymmetrisches Verfahren, d.h. es gilt  $\partial_\phi = 0, \partial_\theta = 0$ . Um die Geometrie der Scheibenphase akkurat beschreiben zu können, muss zumindest für die meridionale Koordinate  $\theta$  die Symmetrieannahme fallengelassen werden. Im Folgenden wird der Ansatz zur Projektion der kugelsymmetrischen Kollapslösung auf die neue Geometrie beschrieben.

Zunächst wird davon ausgegangen, dass das radiale Temperaturprofil entlang der Mittelebene der Scheibe dem der kollabierten Wolke zur Zeit  $t = t_C$  entspricht:

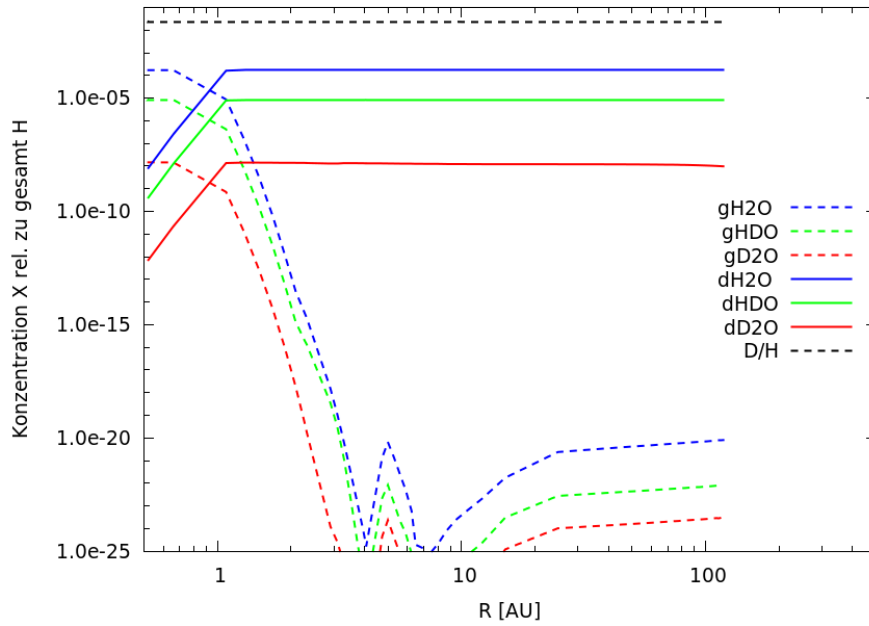
$$T_C(r)|_{\theta=\pi/2} = T_D(r)|_{z=0} \quad (3.2)$$

Mit der zusätzlichen Annahme vertikaler Isothermie, wie sie auch im Modell von Takeuchi & Lin (2002) angenommen wird, kann nach Gleichung 2.46 bzw. mit dem Potenzansatz nach Takeuchi & Lin (ebd.) die Skalenhöhe der äquivalenten Scheibe bestimmt





(a)



(b)

**Abb. 3.12.:** Finale chemische Zusammensetzung nach dem Kollaps für einige exemplarische Spezies (a) und für die deuterierten Varianten des Wassers (b). Die durchgezogenen Linien stehen für auskondensierte Spezies in der Eisphase, die gestrichelten beschreiben die gasförmige Phase.

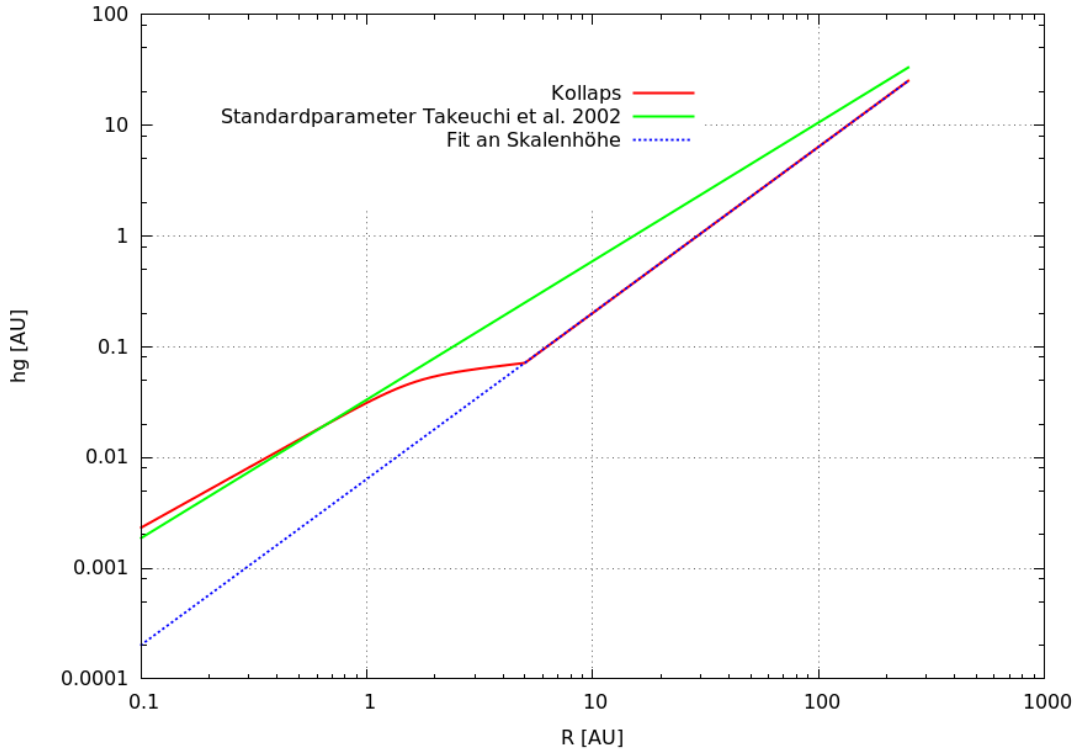
werden:

$$h_g = \left( \frac{r^3 c_s^2}{GM_*} \right)^{1/2} \cong h_0 \left( \frac{r}{r_0} \right)^{(q+3)/2}. \quad (3.3)$$

Dabei ist  $c_s = c_s(T)$  eine reine Funktion der Temperatur (Clarke & Carswell, 2007):

$$c_s(T) = \left( \frac{k_B \cdot T_C}{\mu \cdot m_H} \right)^{1/2}. \quad (3.4)$$

$k_B$  bezeichnet hier die Boltzmann- Konstante und  $\mu \cdot m_H = \bar{m}$  die mittlere Teilchenmasse, wobei  $m_H$  die Masse eines Wasserstoffatoms und  $\mu = 2.34$  der auf Wasserstoff normierte gewichtete Mittelwert der vorhandenen Moleküle ist. Die sich daraus ergebenden Profile der Skalenhöhe sind in Abbildung 3.13 dargestellt, wobei sich die Parameter  $h_0$  und  $q$  durch einen Fit an die aus dem Kollaps hervorgehende Skalenhöhe zu  $h_0 \approx 6,4 \times 10^{-3}$  AU und  $q \approx -0,02$  ergeben. Man erkennt das die resultierende Scheibe ein geringeres Seitenverhältnis besitzt als die Standardscheibe nach Takeuchi & Lin (2002), welche mit den Standardparametern einem MMSN entspricht.



**Abb. 3.13.:** Skalenhöhe der äquivalenten Scheibe nach Gleichung 2.46 durch Annahme vertikaler Isothermie und Verwendung des radialen Temperaturprofils am Ende der Kollapsphase (durchgezogene rote Linie), Fit des Höhenprofils mit dem Potenzansatz nach Takeuchi & Lin (2002) (gestrichelte blaue Linie), sowie Verlauf der Skalenhöhe mit den Standardparametern selbigen Modells  $h_0^{Std} = 3,33 \times 10^{-2}$  AU und  $q^{Std} = -0,5$  (grüne durchgezogene Linie).

Ein analoges Vorgehen erfolgt für die Bestimmung des Dichteprofiles der stationären Scheibe gemäß Gleichung 2.47a. Die Parameter  $\rho_0$  und  $p$  können aus einem Fit an das komplette Dichteprofil des Kollapses, welches alle Bereiche aus Gleichung 2.38 umfasst, bestimmt werden. Eine direkte Verwendung der Parameter  $\rho_{03}$  für  $\rho_0$  bzw.  $\chi_3$  für  $p$  aus Gleichung 2.38, die den Bereich der Scheibe beschreibt, ist wegen der möglicherweise nicht ganz passenden Grenzen  $\omega_2, \omega_3$  unpraktikabel.

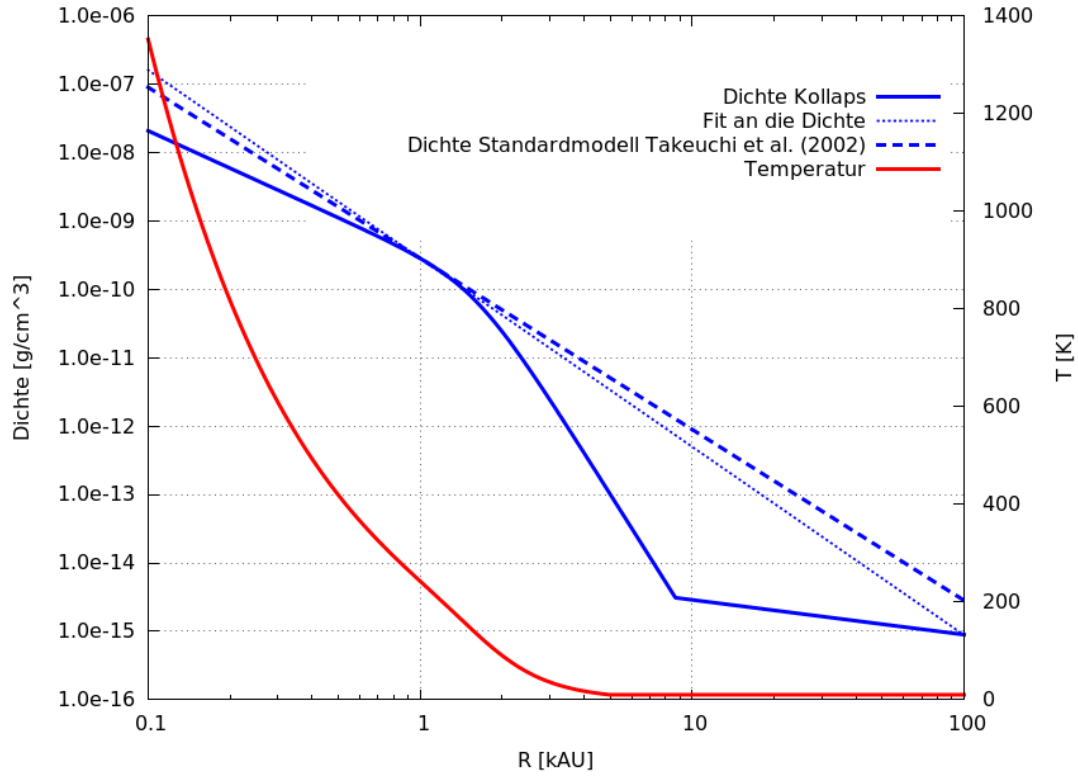
In Abbildung 3.14 sind sowohl  $\rho|_{t=t_C}$  als auch  $T|_{t=t_C}$  am Ende der Kollapsphase dargestellt. Desweiteren ist der Fit an das Dichteprofil sowie der Verlauf der Skalenhöhe mit den Standardparametern des Modells von ebd. eingetragen. Aus dem Fit an das Dichteprofil sich die Werte  $\rho_0 = 2,83 \times 10^{-10} [g/cm^3]$  sowie  $p = -2.753$ . Eine Darstellung des Dichteprofiles von Gas und Staub über der Mittelebene der Scheibe mit den ermittelten Parametern ist in Abbildung 3.15 zu sehen. In Tabelle 3.4 werden die ermittelten charakteristischen Indizes mit anderen, auf einem Potenzansatz basierenden Scheibenmodellen verglichen. Die hier ermittelte Scheibenstruktur zeigt einen wesentlich flacheren Temperaturgradienten aufgrund des kleineren Exponenten  $q$ , als dieser beispielsweise im MMSN Modell angenommen wird. Am Verhältnis  $h_g/r$  erkennt man, dass die Höhe der Scheibe schneller mit dem Radius zunimmt, als im Falle der Vergleichsmodelle. Wegen des kleineren Wertes von  $h_0$  ist die Höhe über der Mittelebene insgesamt jedoch geringer (vgl. Abbildung 3.13). Aufgrund des höheren Exponenten der Zeildichte  $p_s$  fällt die Masse der Scheibe langsamer zu größeren Abständen hin ab, als vom MMSN erwartet. Die hier simulierte Scheibe ist also insgesamt flacher, dichter und kälter als man es in diesem Stadium erwarten würde.

Aus dem aufintegrierten Dichteprofil am Ende des Kollaps ergibt sich die Gesamtmasse der entstehenden Scheibe ohne den Protostern über

$$M_D \approx M_C = 4\pi \int_{R_0}^{R_D} \rho_C(r) r^2 dr \quad (3.5)$$

zu  $M_D \approx 0,025326 M_\odot$  mit einer Ausdehnung von  $r \in [0, 1\text{AU} \dots 130\text{AU}]$ .

In nachfolgendem Abschnitt 3.4 wird eine Machbarkeitsstudie zur Fortführung des beschriebenen Lagrange Ansatzes für die Scheibenphase durchgeführt. Das in Abschnitt 2.4 beschriebene physikalische Scheibenmodell wird mit den hier ermittelten Werten für die Parametern  $p$ ,  $q$ ,  $\rho_0$  und  $h_0$  initialisiert. Ausgehend vom chemischen Zustand am Ende des Kollapses wird die Scheibenphase anschließend für  $10^4$  Jahre entwickelt. Aufgrund der fehlenden vertikalen Profilinformatoren von Dichte, Temperatur und Strahlungsparametern, mussten hier beim Übergang vom Kollaps zur Scheibendynamik für fast alle Lagrange-Pfade diskontinuierliche Änderungen der lokalen physikalischen Größen, u.a.  $\rho(t)$  und  $T(t)$ , in Kauf genommen werden. Im Geiste der hier präsentierten Strategie der

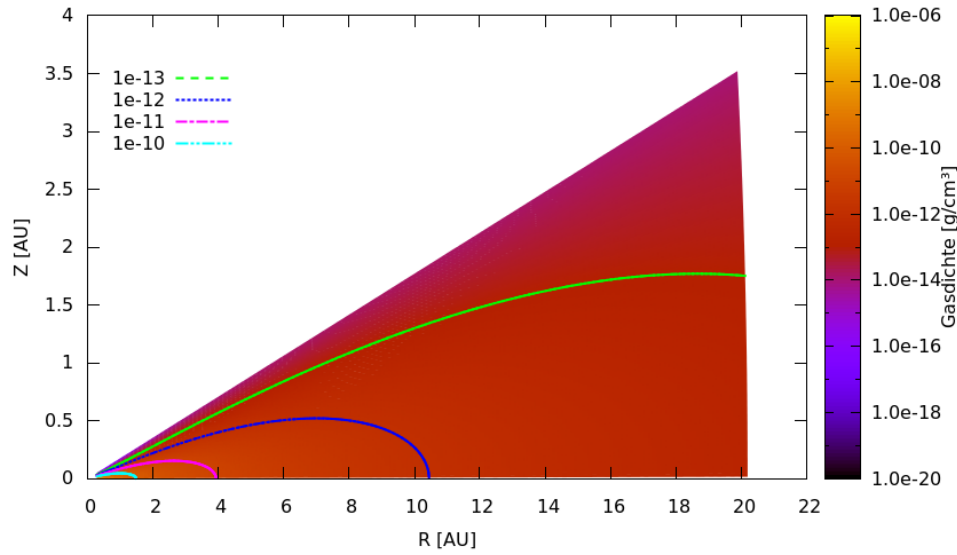


**Abb. 3.14.:** Dichte-  $\rho|_{t=t_C}$  und Temperaturprofil  $T|_{t=t_C}$  am Ende der Kollapsphase. Aus dem Fit an das Dichteprofil ergeben sich die Parameter  $\rho_0 = 2,83 \times 10^{-10}$   $[\text{g}/\text{cm}^3]$  und  $p = -2.753$ .

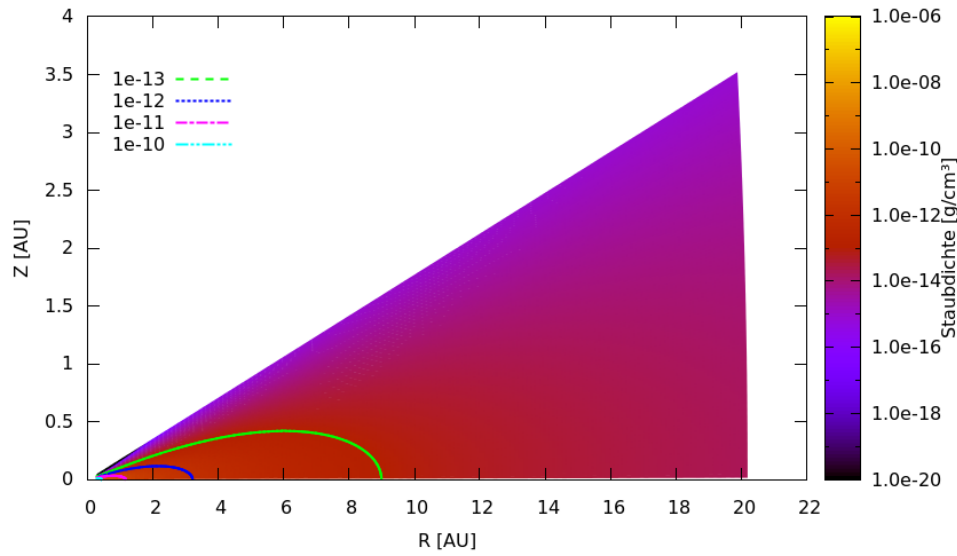
fortlaufend kontinuierlichen Beschreibung des Solaren Nebels sind solche Unstetigkeiten natürlich nicht erwünscht. Aus diesem Grund kann hier leider keine Aussage über die Unterschiede, die sich zwischen kontinuierlicher und diskontinuierlicher Entwicklung des SN für die Scheibenphase ergeben, getroffen werden.

Charakteristische Exponenten zur Berechnung von	Fit an TL2002	MMSN	CY2010
$h_g/r$ (Gleichung 3.3)	$\approx 1/2$	$1/4$	$2/7$
$T$ (Gleichung 3.3)	$\approx -0,02$	$-1/2$	$-3/7$
$\Sigma_g$ (Gleichung 3.5)	$\approx -1,253$	$-3/2$	$-3/2$

**Tabelle 3.4.:** Charakteristische Exponenten des aus dem Kollaps ermittelten Scheibenmodells im Vergleich zu Modellen, die ebenfalls auf einem Potenzansatz aufbauen. Für eine Diskussion des MMSN bzw. CY2010 Modells siehe Bitsch et al. (2014, Tabelle 2).



(a) Gasdichte



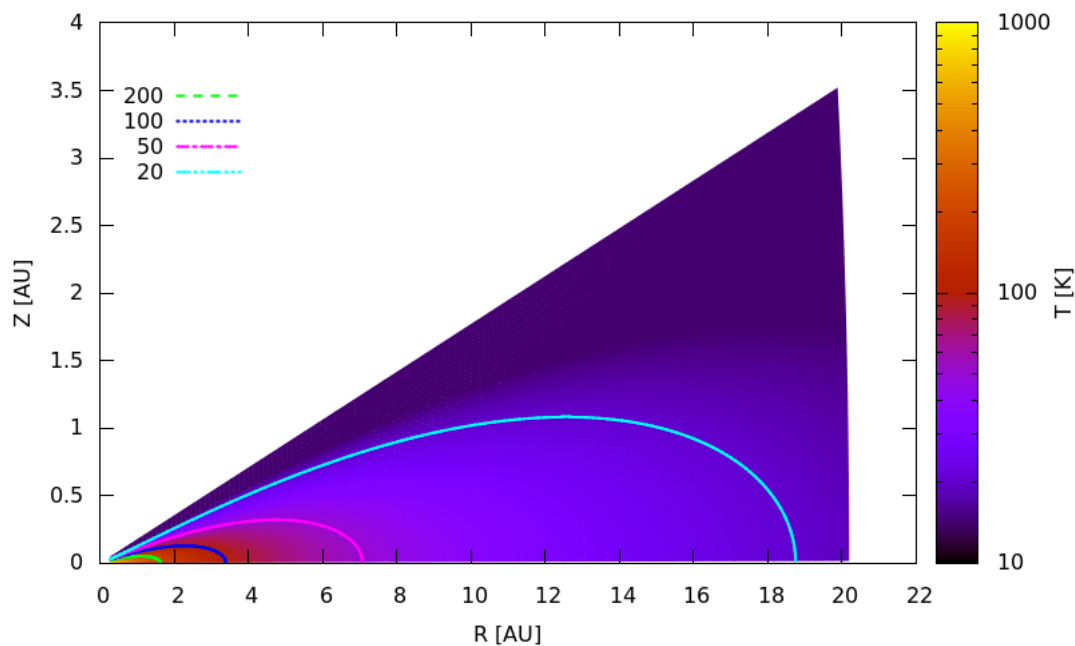
(b) Staubdichte

**Abb. 3.15.:** Dargestellt sind die Dichteprofile von Gas (a) und von Staubpartikeln des Radius  $s = 1 \mu\text{m}$  (b) über der Mittelebene der Scheibe nach  $t = 10^4$  a. Sie resultieren aus der numerischen Lösung von Gleichung 2.48 mithilfe des in Abschnitt A.2 präsentierten Ansatzes. Zur besseren Orientierung sind einige Isolinien eingezeichnet.

### 3.4. Machbarkeitsstudie zur chemischen Initialisierung der Scheibenphase

Aufbauend auf den radialen chemischen Profilen des Kollaps (siehe Abbildung 3.12) wird die chemische Konzentration in der Scheibe nach dem Modell von Takeuchi & Lin (2002) bestimmt. Für das Temperaturprofil wird von einem Verlauf gemäß Abbildung 3.16 ausgegangen. Ein solches ergibt sich, wenn über den polytropen Ansatz für die Zustandsgleichung 2.37e der Druck bestimmt und zusammen mit dem hydrostatischen Dichteprofil in die reguläre Zustandsgleichung eingesetzt wird. Die Parameter  $K_P$  und  $\iota$  sind dabei dieselben, wie sie auch für die Berechnung des Kollapsmodells benutzt werden. Das sich ergebende Temperaturfeld stimmt in etwa mit dem des Kollaps überein, zeigt aber eine etwas höhere Temperatur entlang der Mittelebene. Diese Abweichung ergibt sich aufgrund des Fits an das Dichteprofil am Ende des Kollaps (vergleiche Abbildung 3.14). Beispielsweise wird die Evaporationstemperatur von Wasser ( $T \approx 100$  K) dadurch in einem etwas größeren Abstand vom Zentrum erreicht, als dies im Kollapsmodell der Fall ist.

Im Folgenden werden 100 Lagrange-Pakete in der Scheibengeometrie platziert und an-



**Abb. 3.16.:** Temperaturverteilung in der Scheibe. Die Bestimmung erfolgt durch Kombination des polytropen Ansatzes des Kollaps mit dem hydrostatischen Dichteprofil der Scheibe. Eingezeichnet sind die Isokonzentrationslinien für 20, 50, 100 und 200 K.

hand ihres radialen Abstands aus dem Endzustand des Kollaps chemisch initialisiert. Die physikalischen Parameter werden wie in Abschnitt 2.4.4 beschrieben in das Chemiemodell eingespeist, und daraus die zeitliche Entwicklung der Spezies innerhalb des Lagrange-Pakets berechnet. Der räumliche Verlauf der chemischen Konzentrationen zum Zeitpunkt  $t$  wird anschließend aus den Positionen der Pakete interpoliert. Die Pakete ändern ihre Positionen dabei gemäß Gleichung 2.41. Das Geschwindigkeitsfeld berechnet sich gemäß des in Abschnitt 2.4.2 beschriebenen Kopplungszeitskalenansatzes. Für die Größe des Staubburchmessers wird der kanonische Wert von  $s = 1 \mu\text{m}$  angenommen, der häufig für die Berechnung der Entwicklung Protoplanetarer Scheiben verwendet wird (Blum & Wurm, 2008).

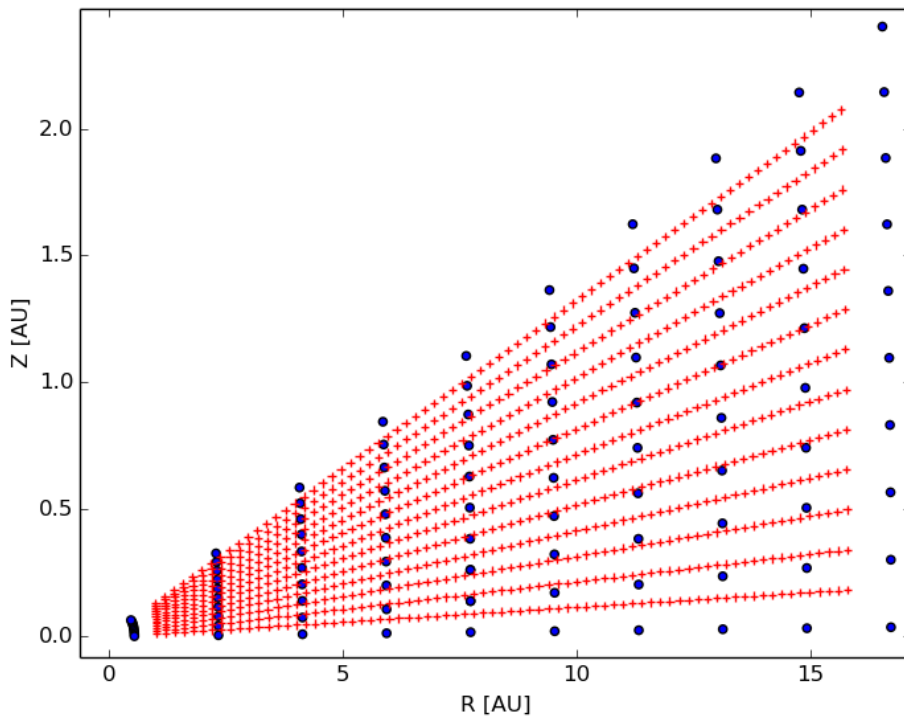
In Abbildung 3.17 sind das zu diesem Zweck konstruierte Hilfsgitter und die Positionen der Pakete dargestellt. Die, im Vergleich zur Lebensdauer der T-Tauri Scheibenphase von  $10^6$  Jahren, verhältnismäßig kurze Simulationsdauer von  $10^4$  Jahren, ergibt sich aus dem Problem der wandernden Partikel. Durch den Akkretionsprozess und die Auswärtsdrift entlang der Mittelebene wird die Überdeckung des Hilfsgitters mit der Zeit schlechter, sodass eine Interpolation mit akzeptablen Fehlern nicht mehr möglich ist. Zusätzlich gibt es wie im Falle des Kollapses immer Pfade, für die der chemische DGL Löser keine Konvergenz erreichen kann, sodass die zugehörigen Werte ab diesem Zeitpunkt von der Interpolation ausgeschlossen werden müssen. Beide Effekte müssten durch das Einbringen neuer Lagrange-Pakete kompensiert werden, was jedoch die Frage nach einer passenden Initialisierung neu aufwirft. Um solche Komplikationen zu vermeiden, wurde diese Machbarkeitsstudie auf die genannte Simulationszeit von  $10^4$  Jahren begrenzt. Der im Vergleich zum eigentlichen Scheibendurchmesser ebenfalls geringere Radius des Simulationsgitters ist hingegen durch die analytische Natur der Randbedingungen unproblematisch. Über die hier gesetzte Simulationszeit stimmt das analytische und numerische Dichteprofil gut überein, wobei der Unterschied weniger als 10% beträgt und vor allem in Scheibenregionen mit großer Skalenhöhe  $h_g$  auftritt, in denen die getroffenen Näherungen des Modells von Takeuchi & Lin (2002) schlechter werden.

Für das ISRF wurden dieselben Annahmen getroffen, wie im Falle des Kollaps. Eine zusätzliche Strahlung durch den Protostern wurde nicht berücksichtigt. Die Abschwächung des Strahlungsfeldes  $A_v$  wurde durch vertikale Integration des Produktes aus Staubbichte  $\rho_d$  und  $\kappa$  nach Pollack et al. (1994) ermittelt. Als CRP Ionisationsrate  $\zeta_{CRP}$  wurde der kanonische Wert von  $1,3 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$  gewählt, und seine Abschwächung in der jeweiligen Höhe  $z$  über der Mittelebene der Scheibe in Abhängigkeit von der Zylinderhöhe  $\Sigma_g$  gemäß dem Ansatz

$$\zeta_{CRP}(z) = \zeta_{CRP} \exp \left( -\Sigma_g \operatorname{erf} \left( \frac{z}{h_g \sqrt{2}} \right) \Sigma_{CRP}^{-1} \right) \quad (3.6)$$

berechnet. Dabei ist  $\Sigma_{CRP} \approx 96 \text{ g cm}^{-2}$  die hier angenommene Eindringtiefe von kosmischer Strahlung (vergleiche Abschnitt 2.1.1). Es ist zwar jüngst in Frage gestellt worden, ob die kosmische Strahlung in Protoplanetaren Scheiben ebenso wirksam ist wie in früheren Phasen des SN (Cleeves et al., 2013), die mit diesem Ansatz ermittelten Ionisationsraten für die Scheibenmaterie werden hier jedoch als Approximation nullter Ordnung auch für andere Ionisationsmechanismen wie Röntgenstrahlung oder Ionisation durch Radionukleide angenommen.

In Abbildung 3.18 ist die Wasserkonzentration in der Scheibe aufgetragen. Durch die



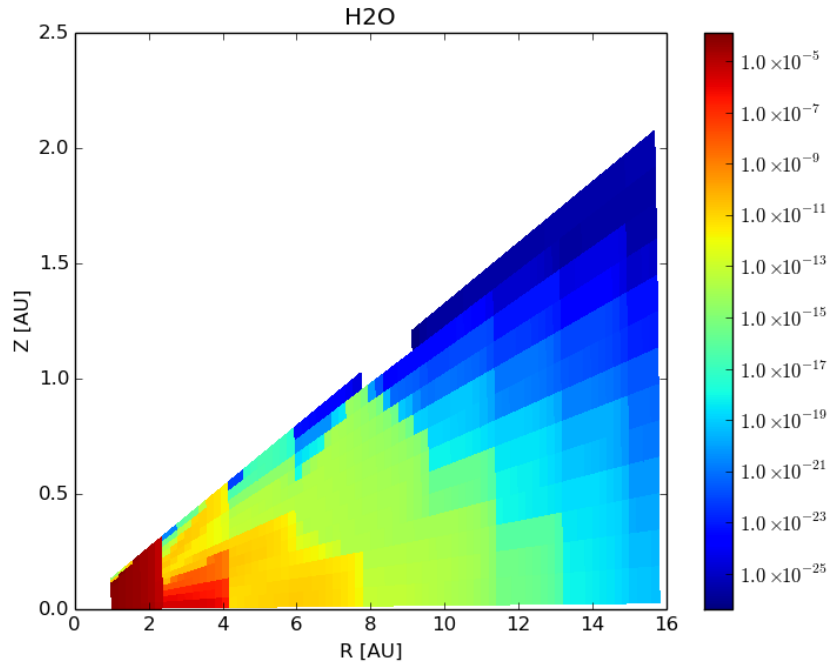
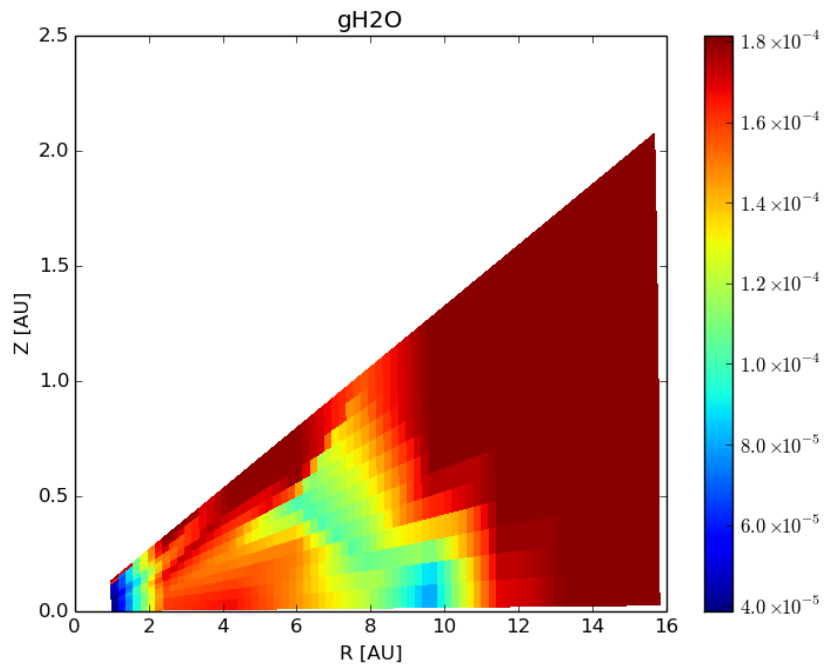
**Abb. 3.17.:** Interpolation der Lagrangepakete (blaue Kreise) auf ein Hilfsgitter (rote Kreuze) mittels linearer Interpolation. Die Ergebnisse der Interpolation sind für Wasser und seine deuterierten Formen in den Abbildungen 3.18 bzw. 3.19 dargestellt.

etwas höhere Temperatur im Vergleich zum Kollaps verschiebt sich die Evaporationszone auf der Mittelebene zu größeren Radien. Die relativen Konzentrationen von  $H_2O$  in der Eisphase bleiben jedoch auch in diesem Fall bis zu einem Radius von 2 AU größtenteils über  $1,4 \times 10^{-4}$ . Erst innerhalb dieses Radius zeigt auch das Wasser in der Gasphase einen starken Anstieg auf über  $10^{-5}$ . Gut zu erkennen ist außerdem die starke Abhängigkeit der jeweiligen Konzentration von der vertikalen Höhe über der Mittelebene der Scheibe,

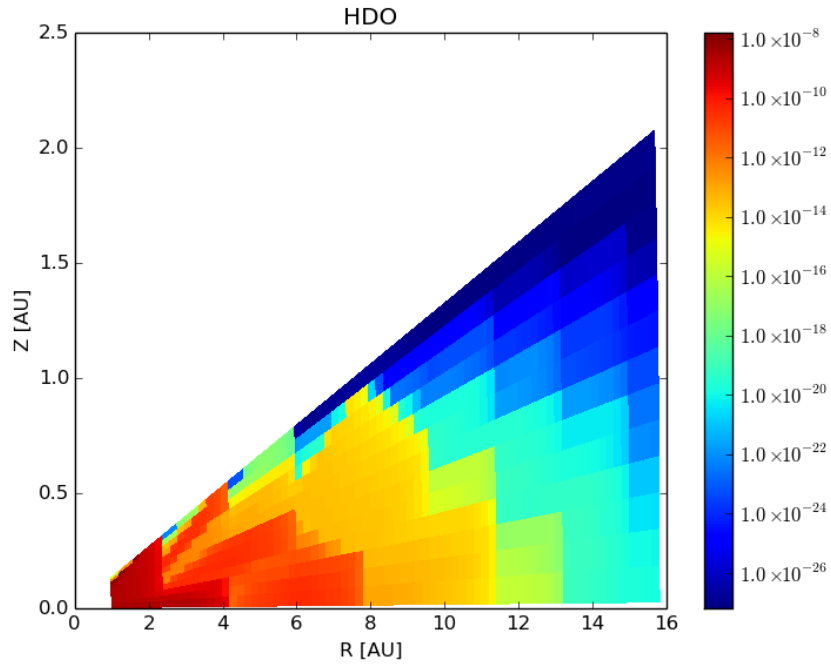
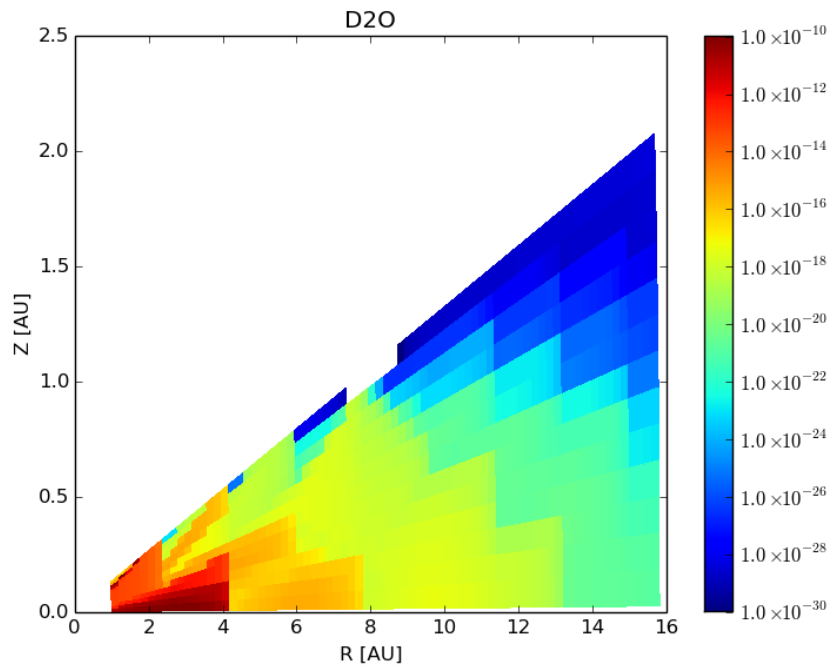


bedingt durch die dort vorherrschenden niedrigeren Temperaturen und Dichten. Wie im Falle des Kollaps scheint Wassereis jedoch am geringsten von dieser Abhängigkeit betroffen zu sein. Der Grund hierfür könnte wiederum in einer niedrigen Desorptionsrate liegen.

Die deuterierten Wasserspezies in der Gasphase zeigen einen ähnlichen Verlauf wie die nicht deuterierte und zeigen mit einer maximalen Konzentration von  $X_{HDO} \approx 10^{-8}$  bzw.  $X_{D_2O} \approx 10^{-10}$  auch ähnliche Verhältnisse in der Evaporationsregion im Bereich  $r < 2$  AU (siehe Abbildung 3.19). Auffällig ist jedoch, dass die relative Konzentration von  $HDO$  bei mittleren radialen Abständen vom Zentrum zwischen  $4 \text{ AU} < r < 10 \text{ AU}$  schwächer abfällt als  $X_{H_2O}$ , sodass deren Verhältnis in diesem Bereich nur wenig kleiner als 1 ist. Ein Grund hierfür könnte die höhere Sensibilität von  $HDO$  gegenüber den Anfangsbedingungen sein. Der in Abbildung 3.11 zunächst eintretende Abfall im  $D/H$  Verhältnis des Gesamtwasseranteils ist in hohem Maße auf die Evaporation von  $HDO$  aus der Eisphase zurückzuführen. Erst nach  $t > 0,3 \text{ Ma}$  kann sich der ursprüngliche Wert in etwa wieder einstellen. Sollte dieser Prozess auch für die Scheibenphase eine Rolle spielen, zeigt sich auch hier wieder die Problematik der diskontinuierlichen Anfangsbedingungen.

(a)  $H_2O$  in der Gasphase(b)  $H_2O$  in der Eisphase

**Abb. 3.18.:** Relative Anteile von gasförmigem  $H_2O$  (a) und von kondensiertem, eisförmigem  $H_2O$  (b) jeweils relativ zum gesamten Wasserstoff in der Scheibenphase.

(a)  $HDO$  in der Gasphase(b)  $D_2O$  in der Gasphase

**Abb. 3.19.:** Relative Anteile von  $HDO$  (a) und  $D_2O$  (b) jeweils relativ zum gesamten Wasserstoff in der Scheibenphase.



## 4. Diskussion der Ergebnisse

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse des vorherigen Abschnitts 3 diskutiert und mit der verfügbaren Literatur verglichen. Zunächst erfolgt eine Bewertung der chemischen Entwicklung in den einzelnen Phasen des SN. In Abschnitt 4.4 werden der Ansatz einer kontinuierlichen Initialisierung bewertet und die offenen Punkte, sowie mögliche weitere Forschungsrichtungen aufgezeigt. Zum Abschluss wird ein Fazit der Arbeit gezogen und die vorliegende Studie zusammengefasst.

### 4.1. Bewertung der Ergebnisse der Wolkenphase

Wie zu erwarten, und übereinstimmend mit Beobachtungen, ist der Anteil an Wasser in der Gasphase vernachlässigbar gering gegenüber dem in der Eisphase. Die berechnete Konzentration relativ zu gesamt  $H$  ist mit ca.  $10^{-10}$  noch eine Größenordnung niedriger als Beobachtungen nahelegen (Caselli & Ceccarelli, 2012), aber noch innerhalb der von Taquet et al. (2013b) angenommenen möglichen Varianz für die Einhüllende von Protosternen. Dies kann an der, gegenüber anderen Modellen, etwas niedrigeren Rate für die Desorptionseffizienz von Wasser von der Stauboberfläche liegen (Öberg et al., 2009a; Öberg et al., 2009b).

In der Staubphase ist die Wasserkonzentration relativ unabhängig von Strahlung und dem Alter des Kerns. Dies harmonisiert aufgrund der hohen Abschirmung durch die Einhüllende gut mit der Studie von Taquet et al. (2013b, Abbildung 4), in der die Autoren zeigen, dass ab einer Abschirmung von mehr als 2 Magnituden kaum noch Änderungen in der Konzentration des Wassereisanteils auftreten, auch wenn andere Parameter variiert werden. Auch Coutens et al. (2012) stellten in kalten Kernen keinen Zusammenhang zwischen der Dichte der Wolke und der relativen Wasserkonzentration fest. Die hier ermittelte relative Konzentration in der Eisphase von  $1,8 \times 10^{-4}$  stimmt ebenfalls gut mit Beobachtungen überein (Caselli & Ceccarelli, 2012; Taquet et al., 2013b).

Der hier berechnete Massenanteil von Wasser am Gesamtgewicht ist um eine Größenordnung niedriger als eine Messung an der Dunkelwolke L1544 vermuten lässt.

Bei diesem Objekt wurde ein Gesamtwassergehalt von  $2,5 \times 10^{-3} M_{\odot}$  innerhalb eines Radius von 10 kAU ausgemacht (Caselli et al., 2012). L1544 ist wegen seines größeren Radius und beginnender Kontraktion jedoch auch dichter ( $n \approx 10^5 \text{ cm}^{-3}$ ) als der hier präsentierte PPSN Kern (siehe Tabelle 3.1). Sein einsetzender Kollaps macht ihn jedoch zu einem guten Vergleichspartner für die Initialisierung der sich anschließenden Kollapsphase.

Die Ergebnisse für die Deuterierung des Wasseranteils der vorliegenden Studie betragen in der Gasphase  $HDO/H_2O \in [0,003 \dots 0,02]$  sowie  $D_2O/H_2O \in [0,0001 \dots 0,006]$  im Kern. In der Übergangszone zur Einhüllenden ergeben sich weit kleinere Werte. In der Eisphase ist  $HDO/H_2O \in [0,03 \dots 0,06]$  sowie  $D_2O/H_2O \in [10^{-6} \dots 0,01]$ . Im Inneren des Kerns scheint der Anteil an Wassereis gegenüber anderen auskondensierten Spezies mit fortschreitendem Alter zuzunehmen. Dieser Effekt ist jedoch gering und wird sich in Observationen kaum auflösen lassen. Die Werte entsprechen in etwa denen der kalten Einhüllenden von Protosternen (siehe nächster Abschnitt).

Da der Gesamtwassergehalt der Kerne durch den Einfluss unterschiedlicher äußerer Strahlungsfelder kaum qualitative Änderungen zeigt, lässt sich vermuten, dass auch in Clustern eingebettete Kerne einen ähnlichen Wassergehalt aufweisen können wie isolierte Kerne, sofern ihre Abschirmung gegenüber der Strahlung stark genug ist.

Da die mit dem hier vorgestellten Kernmodell berechneten relativen chemischen Konzentrationen auch bereits bezüglich anderer Verbindungen wie  $HCN$ ,  $HCO^+$ ,  $NH_3$  und  $CO$  erfolgreich mit den Beobachtungen eines Kerns innerhalb des L134N Wolkenfilaments verglichen wurden (Tornow et al., 2013b), stellt das Kernmodell einen verlässlichen Teil in der Simulationskette dar.

## 4.2. Bewertung der Ergebnisse der Kollapsphase

Den größten Einfluss auf die chemischen Gegebenheiten in der Kollapsphase hat eindeutig die thermische Desorption von Stoffen, die aufgrund der graduellen Erwärmung entlang ihrer Trajektorien einsetzt. In Abbildung 3.12 sind die schon von Visser et al. (2011) beschriebenen Zonen der entsprechend ihrer Volatilität verdampfenden Stoffe zu erkennen.

Zum Ende der Simulation zeigt sich keine radiale Abhängigkeit des  $D/H$  Verhältnisses im Wasseranteil. Zeitlich ist für Pfade jenseits von 2 kAU Startradius jedoch eine Zunahme des  $D/H$  Verhältnisses von 0,0001 auf 0,025 während der Kontraktion der Wolke zu beobachten. Auch nach der Desorption des Wassers von der Stauroberfläche ist keine Änderung in der Deuterium Fraktionierung des Wasseranteils zu erkennen. Dies liegt daran, dass die ausgleichenden Neutral-Neutral Reaktionen in der Gasphase wegen

der zu diesem Zeitpunkt geringen Umgebungstemperatur noch nicht einsetzen konnten. In Beobachtungen zeigt sich, dass die berechneten chemischen Konzentrationen in einem kollabierenden Wolkenkern relativ gut mit den Zuständen in Dunkelwolken übereinstimmen (Schöier et al., 2002). Die größten Konzentrationsunterschiede zwischen diesen beiden Stadien des SN wurden dabei für Stoffe wie  $H_2CO$ ,  $CH_3OH$ ,  $SO$  und  $SO_2$  ausgemacht (ebd.). Diese Verbindungen stellen somit die aussichtsreichsten Kandidaten für eine Verifikation der Kollapschemie dar, da sie besonders sensibel auf die vorherrschenden Gegebenheiten während des Kollapses reagieren. Die Bestimmung von relativen Stoffkonzentrationen in kollabierenden Wolkenkernen durch astronomische Untersuchungen stellt allerdings ein schwieriges Unterfangen dar, da ihre Umgebung von dynamischen Effekten wie austretenden Jets und Schockphänomenen bestimmt wird, welche die Emissionslinien aus dem Zentrum der Wolken überlagern können (Kristensen et al., 2012). Für warme Kerne, d.h. solche, die sich bereits aufgrund ihrer Kontraktion erwärmt haben, sind bis heute nur wenige Messungen präsentiert worden, die eine ausreichende räumliche Auflösung besitzen, um solche Phänomene berücksichtigen zu können (Coutens et al., 2013; Persson et al., 2014; Taquet et al., 2013a,b). Die ermittelten Werte für das  $HDO/H_2O$  Gasphasen-Verhältnis in unterschiedlichen beobachteten Objekten befinden sich in einem Bereich zwischen  $[5, 9 \dots 19, 1] \times 10^{-4}$  (Persson et al., 2014, Tabelle A1). Die Anregungstemperaturen für das Gas sind dabei mit  $120 \pm 60$  K vergleichbar mit der Situation in der Corino Region der hier präsentierten Ergebnisse. In Coutens et al. (2013) wurde zusätzlich das  $D_2O/H_2O$  Verhältnis eines Protosterns untersucht, wobei die Gasphasen-Werte  $7 \times 10^{-5}$  für die Corino Region und  $3 \times 10^{-4}$  für die Einhüllende betragen.

In den hier präsentierten Ergebnissen sind in der Gasphase interessante Effekte der periodischen Zu- und Abnahme des  $HDO$  bzw.  $D_2O$  zu  $H_2O$  Verhältnisses in einem Bereich  $r < 10$  AU (siehe Abbildung 3.10) zu sehen. Die genannten Verhältnisse steigen dabei bis auf einen maximalen Wert von  $\left(\frac{HDO}{H_2O}\right) \leq 0,5$  bzw.  $\left(\frac{D_2O}{H_2O}\right) \leq 0,03$  an, und variierten insgesamt um bis zu 2,5 Größenordnungen. In der Corino Region liegen diese Verhältnisse jedoch eher in einem Bereich  $\left(\frac{HDO}{H_2O}\right) \approx [0,01 \dots 0,1]$  bzw.  $\left(\frac{D_2O}{H_2O}\right) \approx [8 \times 10^{-5} \dots 4 \times 10^{-4}]$ . Betrachtet man die globale Deuterierung, liegen die Werte noch deutlich über denen, welche für Kometen ermittelt wurden (siehe Abbildung 1.5). Dies stimmt jedoch qualitativ mit den genannten Messungen an Sternentstehungsregionen überein.

### 4.3. Bewertung der Initialisierung der Scheibenphase

Das in das SN Modell integrierte Scheibenmodell ist bis dato von sehr einfacher Natur im Vergleich zu anderen Studien, die sich auf diesen Teilbereich konzentrieren (Albertsson

et al., 2014; Du & Bergin, 2014; Yang et al., 2013). Es dient primär dazu, die Initialisierung der Scheibe aus dem Endzustand des Kollaps zu bewerten. Die physikalischen Parameter, die aus dem Kollaps resultieren, liegen dabei in dem Bereich, der typischerweise für die Simulation der Scheibenphase gewählt wird (siehe Tabelle 3.4). Bedingt durch den rein polytropen Ansatz für die Temperatur in der Kollapsphase, ist die resultierende Scheibe jedoch sehr kalt und fächert weniger stark auf.

Schon bei diesem einfachen Scheibenmodell ergeben sich jedoch wichtige Hinweise, die bei der Initialisierung zu beachten sind. So ist das  $X_{HDO}/X_{H_2O}$  Verhältnis der Gasphase in der Anfangszeit der Scheibe durch die Evaporation von eisförmigem  $HDO$  noch stark erhöht, und liegt etwas unter 1, was an der größeren Sensibilität von  $HDO$  gegenüber den Anfangsbedingungen liegen könnte. Wegen des geringeren radialen Temperaturgradienten im Vergleich zu anderen Modellen, ist es jedoch schwer die chemischen Konzentrationen zu vergleichen. Physikalische Mechanismen, welche die Deuterierung des Wasseranteils über die Simulationsdauer senken würden, sind momentan noch nicht integriert. Einen Kandidaten für einen solchen Mechanismus stellt beispielsweise der Kreislauf zwischen dissoziierenden Photoreaktionen in der Atmosphäre der Scheibe und neuerlicher Synthese von Wasser in den inneren Regionen dar (Furuya et al., 2013). Ohne die Einbeziehung solcher Effekte, die auf der Mischung unterschiedlicher Regionen beruhen, zeigen auch andere Studien ein höheres  $D/H$  Verhältnis im Wasseranteil, welches eher mit Beobachtungen an früheren Phasen des SN übereinstimmt (Aikawa et al., 2012; Albertsson et al., 2014; Willacy & Woods, 2009).

#### 4.4. Bewertung der kontinuierlichen Initialisierung und Ausblick

Das in dieser Arbeit beschriebene Modell des Solaren Nebels hat das Ziel die Entwicklung der chemischen Konzentrationen wichtiger Spezies des Solaren Nebels in einem kontinuierlichen Prozess zu beschreiben. Die drei sich aneinander anschließenden Phasen erstrecken sich dabei über den prästellaren Wolkenkern, dessen Kollaps und die sich dabei ausbildende Protosolare Scheibe mit darauf folgender T-Tauri-Phase. Dieses Ziel ist natürlich sehr ambitioniert, und fordert in dem zugrundeliegenden Modell in seinem jetzigen Entwicklungsstand noch viele Einschränkungen im Hinblick auf wichtige physikalische und chemische Effekte. Einzelne Studien, die sich mit Teilaspekten des SN befassen, gehen in ihrem Detailgrad teilweise deutlich über ihre Analogien in dem hier verwendeten Modell hinaus. So müssen bis dato insbesondere in der Kollaps- und Scheibenphase einige Vereinfachungen getroffen werden. Trotzdem ist dem Autor der



vorliegenden Studie kein anderes Modell bekannt, das den Prozess der kontinuierlichen Entwicklung des gesamten SN in derselben Ausführlichkeit untersucht hat. Anderen Studien ist ebenfalls bekannt, dass eine möglichst kontinuierliche Beschreibung sehr wichtig für die akkurate Darstellung der chemischen Entwicklung des SN ist. Sie versuchen mit den in Abschnitt 1.6 beschriebenen Methoden dieser Herausforderung zu begegnen. Wegen der genannten Einschränkungen dieser Ansätze, würden zukünftige Untersuchungen höchstwahrscheinlich sehr von dem hier präsentierten Ansatz profitieren.

Es existieren allerdings noch einige schlecht bestimmbare Zeitskalen innerhalb des Modells, die sehr von der jeweiligen Entstehungsregion des SN abhängen. Für die Wolkenphase sind dies beispielsweise die Freiheiten bezüglich des vorherrschenden Strahlungsfeldes, dessen Abschirmung und die vermuteten Lebensdauer der Wolke. Solange kein physikalischer Mechanismus integriert ist, der einen Grund für den Beginn des Kollaps des Wolkenkerns liefert, werden diese Zeitskalen schwer zu spezifizieren sein und weiter künstlich gesetzt werden müssen. Ob ein externes Ereignis als Auslöser für den Kollaps des PPSN in Frage kommt, und in welchem Zustand sich der prästellare Kern zu diesem Zeitpunkt befand, wird schwer zu bestimmen sein. Aufschlüsse über diese Fragestellungen kann nur die weitere Erforschung aktiver Sternentstehungsregionen liefern.

Der in dieser Arbeit verwendete Ansatz eines adiabaten Kollaps führt zu einer relativ kalten ersten Scheibe mit einer Eislinie bei ca. 1 – 2 AU. Aufgrund geologischer Funde in Einschlüssen von Asteroiden aus der Frühzeit des Sonnensystems, deren Entstehung mit hohen Temperaturen  $T > 2000$  K in Zusammenhang steht (Connelly et al., 2012), vermutet man jedoch weit höhere Temperaturen für die innere Scheibe. Ein späteres Aufheizen der Scheibe scheint dabei unwahrscheinlich, da für junge Scheiben viskose Reibung ( $Q^+ \sim \Sigma_g \nu \Omega_k^2$ ) die Hauptquelle für Wärmeentwicklung im inneren Scheibenbereich ist (Bitsch et al., 2013) und diese aufgrund der mit der Zeit sinkenden Zeilendichte  $\Sigma$  mit zunehmendem Scheibenalter abnimmt. Dazu wird im Allgemeinen erwartet, dass sich die Riesenplaneten ungefähr im Bereich der Eislinie bildeten, da dort das meiste feste Material für die Akkretion des ersten Planetenkerns zur Verfügung stand. Viele Studien kommen daher zu dem Ergebnis, dass sich die Eislinie eher in einem Abstand von ca. 5 AU zum Protostern befand (Dodson-Robinson et al., 2009; Min et al., 2011; Walsh et al., 2011). Erste Untersuchungen zeigen, dass die Integration einer Energiegleichung in das Kollapsmodell, welche Effekte wie Strahlungstransport und Diffusion berücksichtigt, zu einer stärkeren Aufheizung der inneren Scheibe führt, welche die Position der Eislinie zu größeren radialen Abständen verschiebt. Da die physikalische Modellierung des Kollaps jedoch nicht Teil dieser Arbeit ist, kann auf Details hierzu nicht vertiefend eingegangen werden. Eine weitere Einschränkung des hier verwendeten Kollapsmodells in seiner jetzigen Form ist die Restriktion auf eine sphärische Symmetrie. Legt man das Modell von

Visser et al. (2011) zugrunde, erfahren mehr als 30% des einfallenden Materials große nichtmonotone Umverteilungen noch bevor der Kollaps abgeschlossen ist, d.h. es erfolgt eine Einwärts- gefolgt von einer Auswärtsdrift. Dies ist aufgrund der Einbeziehung einer vertikalen Ausdehnung möglich, da sich Material andernfalls nicht “überholen”, bzw. konvektiv trennen kann. Auch ist die rein radiale Initialisierung der chemischen Konzentrationen im Hinblick auf eine kontinuierliche Beschreibung ihrer Entwicklung durch die fehlende räumliche Dimension äußerst schwierig, wie in Abschnitt 3.4 besprochen wurde. Lösungen für die beiden angesprochenen Einschränkungen des Kollapsmodells sind bereits in der Entwicklung. Letzterer wird durch Integration des geometrisch dicken Scheibenmodells von Stahler et al. (1994) begegnet werden. Durch dieses werden zusätzlich zu den radialen auch vertikale Profilinformationen am Ende des Kollaps zur Verfügung gestellt, die es ermöglichen, die sich anschließende Scheibenphase besser anbinden zu können.

Als Vorteil der semi-analytischen Formulierung des Kollapsmodells ist eine einfache Kopplung an die Entwicklung der Protosonne anzuführen. Dies kann einen nicht zu unterschätzenden Nutzen darstellen, falls realistische Modelle für die Protosonne eingebunden werden. Dies würde es erlauben, besonders für die spätere Scheibenphase wichtige Strahlungsparameter wie UV- und Röntgenstrahlung durch Einbeziehung eines Entwicklungsmodells für PMS Sterne zu bestimmen. Denn während die Akkretion mit zunehmendem Alter der Scheibe nachlässt, nimmt die Strahlungsintensität des neu entstehenden Sterns zu, während er sich langsam zu einem Hauptreihenstern entwickelt. Mit der PISA Datenbank (Dell’Omodarme et al., 2012) existieren bereits Evolutionsmodelle für diese Sternenklasse, die für ein solches Kopplungsvorhaben geeignet erscheinen. Um den vollen Nutzen aus einem solchen Ansatz ziehen zu können, sollte das für das Scheibenmodell verwendete Temperaturmodell auf einem wellenlängenabhängigen Strahlungstransport ähnlich dem Modell von Min et al. (2011) aufbauen. Dass das protosolare UV- bzw. Röntgen- Strahlungsfeld sowohl für die Chemie in Form von Photodissoziation (Fogel et al., 2011), als auch für die Scheibenstruktur in Form von Photoevaporation des Scheibenmaterials (Gorti et al., 2009) große Auswirkungen hat, konnte vielfach gezeigt werden (Akimkin et al., 2013).

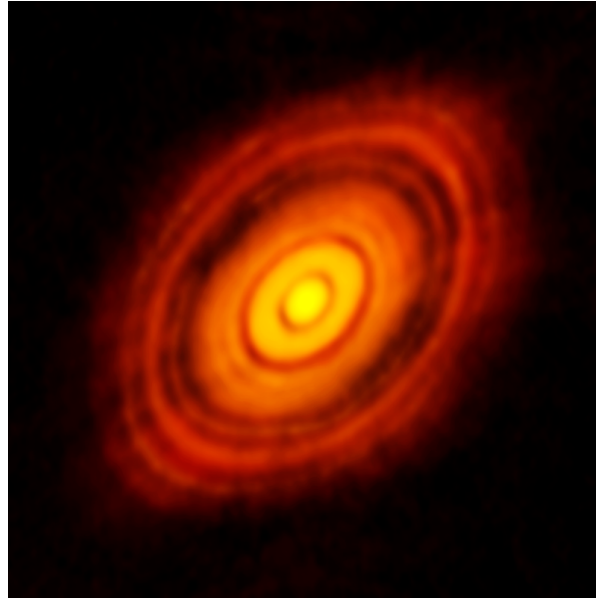
Die Annahme einer stationären Scheibe, wie sie hier getroffen wurde, kann natürlich nicht über die gesamte Lebensdauer der Scheibenphase aufrecht erhalten werden. Verbesserungen des Modells können erzielt werden, indem die Zeitabhängigkeit der Akkretionsrate  $\dot{M}$  und die der Exponenten  $p, q$  im Dichte- bzw. Höhenprofil zugelassen wird (Makalkin & Dorofeeva, 2009). Da das Rechengitter im derzeitigen Modell jedoch an diesen Größen ausgerichtet ist, würde ihre Anpassung auch eine Interpolation zwischen den jeweiligen Rechengittern nötig machen. Zu den Studien, die eine wesentlich realistischere Entwick-

lung der Dichte innerhalb der Scheibe berücksichtigen, gehört u.a. Hersant et al. (2001). Eng verknüpft mit der zeitlichen Entwicklung der Scheibenparameter ist auch die Frage nach der Entwicklung des Staubwachstums (Blum & Wurm, 2008). Die Größenverteilung des Staubes in Protoplanetaren Scheiben hat direkte Auswirkungen auf praktisch alle anderen physikalischen Parameter. Eine Änderung dieser Verteilung durch Koagulation oder Fragmentierung hätte also direkte Konsequenzen auf die Scheibenstruktur (Akimkin et al., 2013). Die Bedeutung des Staubwachstums für die Scheibenstruktur ist jedoch auch insbesondere durch seine enge Verknüpfung mit der chemischen Entwicklung nicht zu unterschätzen. Da das Ausfrieren sowie die Dissoziation von Spezies beinahe zwangsläufig Auswirkungen auf die Größenverteilung des Staubensembles hat, ist es unwahrscheinlich, dass drastische Wechsel der chemischen Konzentrationen, wie sie beispielsweise an der Eislinie auftreten, nicht auch mit einer Änderung dieser Verteilung einhergehen. Dies hat wiederum Auswirkungen auf die Opazität und damit die Temperatur, sodass große Verschiebungen in der Position der Eislinien bei Miteinbeziehung dieser Effekte nicht auszuschließen sind.

Der wichtigste Aspekt der Staubkoagulation für die globale Scheibenstruktur ist natürlich das Entstehen von planetesimalen Körpern. Diese können durch ihre Gravitation das Strömungsfeld des Gases in solcher Weise beeinflussen, dass von Gas und Staub befreite Ringe in der Scheibenstruktur entstehen, was als sog. “Gap Formation” bezeichnet wird. Diese Ringe stören oder unterbrechen möglicherweise den Akkretionsfluss oder können zu nichtkontinuierlicher Akkretion führen (Casassus et al., 2013). In Abbildung 4.1 ist eine durch ALMA gemachte Aufnahme des HL Tau Systems dargestellt. Diese junge Protoplanetare Scheibe mit einem vermuteten Alter von  $\approx 1$  Ma zeigt bereits deutliche Anzeichen von, höchstwahrscheinlich durch Planetenentstehung verursachte, Spaltenbildung in seiner radialen Struktur. Dass dies bei einem so jungen Objekt auftritt, unterstreicht nochmals die Wichtigkeit des Koagulationsprozesses innerhalb der Scheibe. Wegen der deutlich massiveren Scheibe des HL Tau Systems von  $0.13 M_{\odot}$  (Kwon et al., 2011), als sie für den PPSN angenommen wird, ist jedoch nicht sicher, inwieweit diese Ergebnisse auf einen möglichen Vorläufer des Sonnensystems übertragbar sind.

Wie in Abschnitt 4.1 und 4.2 beschrieben, erzielt das hier verwendete Modell gute Ergebnisse für die Verteilung von Wasser in der Wolken- und Kollapsphase. Für die Scheibenphase konnte aus den in Abschnitt 3.4 genannten Gründen noch keine Aussage bezüglich des Nutzens einer kontinuierlichen Beschreibung des SN gemacht werden.

In Studien zu den Unsicherheiten bezüglich der Festlegung der Ratenkoeffizienten der chemischen Reaktionen (Vasyunin et al., 2008; Wakelam et al., 2006, 2005) wurde festgestellt, dass  $H_2O$  zu einer Gruppe von Stoffen gehört, deren Konzentrationen weniger empfindlich auf Variationen in den Ratenkoeffizienten reagieren. Es erscheint wahrscheinlich,



**Abb. 4.1.:** Aufnahme des HL Tau Systems, einer jungen Protoplanetaren Scheibe mit einem vermuteten Alter von  $\sim 1$  Ma, die deutliche Anzeichen von Spaltenbildung aufgrund von Koagulationsprozessen zeigt. Hier könnte es zu einer früheren Planetenbildung kommen als bisher angenommen.

Quelle: ALMA (ESO/NAOJ/NRAO), November 2014

dass diese Gruppe ebenfalls unempfindlicher gegenüber Änderungen in den chemischen Anfangsbedingungen sein könnte. Für einen Nachweis des Nutzens einer kontinuierlichen Initialisierung, wie sie hier beschrieben wird, sollte in einem nächsten Schritt auf Spezies der zweiten Gruppe von sensibleren Verbindungen zurückgegriffen werden. Zu ihnen gehören u.a. die Moleküle  $CS$ ,  $CO_2$ ,  $HCO^+$ ,  $H_2CO$ ,  $C_2H$ ,  $CN$ ,  $HCN$  und  $HNC$  (Vasyunin et al., 2008). Wasser wurde in der hier vorliegenden Studie hauptsächlich wegen seiner Wichtigkeit für biologische und geologische Prozesse als Untersuchungsobjekt gewählt, aber auch seine relativ einfache Synthese im Vergleich zu komplexeren Molekülen war in diesem ersten Schritt von Vorteil für die Interpretation der Ergebnisse. In jüngsten Veröffentlichungen wurde der Einfluss von Ortho- und Para- Wasserstoff auf die Deuterium Fraktionierung untersucht (Albertsson et al., 2014), welcher im vorliegenden Chemiemodul noch nicht berücksichtigt wird. Für spezifische Fragestellungen scheint eine Einbindung der Ergebnisse von Albertsson et al. (ebd.) sinnvoll und mit relativ überschaubarem Aufwand umsetzbar. Im Hinblick auf die numerische Stabilität ist jedoch fraglich, ob eine fortwährende Steigerung der Komplexität des chemischen Modells sinnvoll ist, wenn gleichzeitig einige physikalische Prozesse nur vereinfacht berücksichtigt werden. Auch das jetzige Chemiemodul zeigt aufgrund seiner hohen Dimensionalität unter gewissen Umständen bereits Konvergenzprobleme, und könnte bald an die Grenzen

---

seiner Leistungsfähigkeit stoßen, falls u.a. keine Vereinfachungen in Form von temperaturabhängigen Anwendungsgrenzen für Staubprozesse getroffen werden.



## 5. Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurde ein Multi-Zustandsmodell zur Beschreibung des Anteils von deuteriertem Wasser am Gesamtwassergehalt innerhalb eines möglichen protoplanetaren Vorläufers des Sonnensystems beschrieben. Die einzelnen Phasen orientierten sich dabei an der empirischen Unterteilung der Solaren Nebel Hypothese in hydrostatischen Wolkenkern, kollabierenden Kern und Scheibenphase. Besonderer Wert wurde auf einen konsistenten, zeitlich kontinuierlichen Übergang zwischen den einzelnen Phasen gelegt. Es wurden u.a. die Auswirkungen verschiedener Strahlungsumgebungen auf den Wasseranteil eines Wolkenkerns mit der Masse von  $1,046 M_{\odot}$  untersucht. Hierbei zeigte sich, dass eine Erhöhung des ISRF bis zur dreifachen Intensität wenig Auswirkungen auf den Gesamtwassergehalt des untersuchten Wolkenkerns hat, der jeweils in einem Bereich von ca.  $0,18 \times 10^{-3} M_{\odot}$  lag. Während das meiste Wasser in den äußeren Regionen des Kerns gespeichert ist, ist dessen Deuterierung im kälteren Zentrum höher und lag dort im Bereich von  $[0,017 \dots 0,022]$ . Zur diffusen Einhüllenden hin reduziert sich der Deuteriumgehalt stark auf einen Wert unterhalb von  $10^{-4}$ . Die Quellregion der Wolkenmaterie, die sich nach Ende der Kollapsphase im Bereich der Erdentstehungsregion ansammelt, wurde auf einen ursprünglichen Abstand vom Zentrum zwischen 3819 und 4125 AU bestimmt. Während des Kollapses zeigten sich in der Gasphase radiale Oszillationen im  $D/H$  Verhältnis des Wasseranteils, deren Werte zwischen 0,0001 und 0,025 lagen. Sie decken damit den beobachteten Wertebereich von kalten und heißen Kernen in Sternentstehungsregionen ab. Da im Kollapsmodell keine Transportmechanismen für die durch die Kontraktion generierte Energie integriert ist, ist die entstehende Corino Region bzw. die resultierende Scheibe mit  $T(r = 1 \text{ AU}) \lesssim 200 \text{ K}$  sehr kalt. Die niedrige Temperatur und die ähnliche Quellregion des Scheibenmaterials hatte zur Folge, dass Neutral-Neutral Reaktionen noch nicht effizient genug waren, um die Deuterierung signifikant zu reduzieren. Dies führt zu einem homogenen Verhältniss der Deuterium Fraktionierung des Wassers in der Scheibenregion von 0,025. Die sich aus dem semi-analytischen Kollapsmodell ergebende Scheibe zeigte wegen des geringen Temperaturgradienten auch andere, vom MMSN Modell abweichende, charakteristische Exponenten. Eine kontinuierliche chemische Initialisierung des Scheibenmodells war aufgrund der fehlenden vertikalen Komponente des gegebenen Kollapsmodells leider

nicht möglich. Um dieses Ziel zu erreichen, wird die Einbindung eines Scheibenmodells mit geometrisch dicker Ausdehnung empfohlen, das neben dem radialen auch ein vertikales Dichteprofil liefert



# Literatur

- Abramowicz, Marek A., F. Wallinder, S. Kato & J. Fukue (2006). *The Theory of Accretion Disks*. en. Cambridge University Press. ISBN: 9780521450560.
- Ackermann, M. et al. (2013). “Detection of the Characteristic Pion-Decay Signature in Supernova Remnants”. en. In: *Science* 339.6121, S. 807–811. ISSN: 0036-8075, 1095-9203. DOI: 10.1126/science.1231160.
- A’Hearn, Michael F. et al. (2012). “Cometary Volatiles and the Origin of Comets”. In: *ApJ* 758.1, S. 29. ISSN: 0004-637X, 1538-4357. DOI: 10.1088/0004-637X/758/1/29.
- Aikawa, Y., V. Wakelam, F. Hersant, R. T. Garrod & E. Herbst (2012). “From Prestellar to Protostellar Cores. II. Time Dependence and Deuterium Fractionation”. en. In: *ApJ* 760.1, S. 40. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1088/0004-637X/760/1/40.
- Aikawa, Yuri & Eric Herbst (1999). “Deuterium Fractionation in Protoplanetary Disks”. en. In: *ApJ* 526.1, S. 314. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1086/307973.
- Akimkin, V., S. Zhukovska, D. Wiebe, D. Semenov, Ya Pavlyuchenkov, A. Vasyunin, T. Birnstiel & Th Henning (2013). “Protoplanetary Disk Structure with Grain Evolution: The ANDES Model”. en. In: *ApJ* 766.1, S. 8. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1088/0004-637X/766/1/8.
- Alan Stern, S. (2003). “The evolution of comets in the Oort cloud and Kuiper belt”. en. In: *Nature* 424.6949, S. 639–642. ISSN: 0028-0836. DOI: 10.1038/nature01725.
- Albarède, Francis (2009). “Volatile accretion history of the terrestrial planets and dynamic implications”. In: *Nature* 461.7268, S. 1227–1233. ISSN: 0028-0836. DOI: 10.1038/nature08477.
- Albarede, Francis, Chris Ballhaus, Janne Blichert-Toft, Cin-Ty Lee, Bernard Marty, Frédéric Moynier & Qing-Zhu Yin (2013). “Asteroidal impacts and the origin of terrestrial and lunar volatiles”. In: *Icarus* 222.1, S. 44–52. ISSN: 0019-1035. DOI: 10.1016/j.icarus.2012.10.026.
- Albertsson, T., D. A. Semenov, A. I. Vasyunin, Th. Henning & E. Herbst (2013). “New Extended Deuterium Fractionation Model: Assessment at Dense ISM Conditions and Sensitivity Analysis”. In: *ApJS* 207, S. 27. ISSN: 0067-0049. DOI: 10.1088/0067-0049/207/2/27.

- Albertsson, T., D. Semenov & Th. Henning (2014). “Chemodynamical Deuterium Fractionation in the Early Solar Nebula: The Origin of Water on Earth and in Asteroids and Comets”. In: *ApJ* 784, S. 39. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1088/0004-637X/784/1/39.
- Alexander, C. M. O’d, R. Bowden, M. L. Fogel, K. T. Howard, C. D. K. Herd & L. R. Nittler (2012). “The Provenances of Asteroids, and Their Contributions to the Volatile Inventories of the Terrestrial Planets”. en. In: *Science* 337.6095, S. 721–723. ISSN: 0036-8075, 1095-9203. DOI: 10.1126/science.1223474.
- Altwegg, K. et al. (2014). “67P/Churyumov-Gerasimenko, a Jupiter family comet with a high D/H ratio”. en. In: *Science*, S. 1261952. ISSN: 0036-8075, 1095-9203. DOI: 10.1126/science.1261952.
- Alves, João F., Charles J. Lada & Elizabeth A. Lada (2001). “Internal structure of a cold dark molecular cloud inferred from the extinction of background starlight”. In: *Nature* 409, S. 159–161. ISSN: 0028-0836.
- Andre, Philippe, Derek Ward-Thompson & Mary Barsony (1993). “Submillimeter continuum observations of Rho Ophiuchi A - The candidate protostar VLA 1623 and prestellar clumps”. In: *ApJ* 406, S. 122–141. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1086/172425.
- Armitage, Philip J (2007). “Lecture notes on the formation and early evolution of planetary systems”. In: *arXiv:astro-ph/0701485*.
- Armitage, Philip J. (2011). “Dynamics of Protoplanetary Disks”. In: *ARA&A* 49.1, S. 195–236. ISSN: 0066-4146, 1545-4282. DOI: 10.1146/annurev-astro-081710-102521.
- Balbus, Steven A. & John F. Hawley (1991). “A powerful local shear instability in weakly magnetized disks. I - Linear analysis. II - Nonlinear evolution”. In: *ApJ* 376, S. 214–233. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1086/170270.
- Balbus, Steven A. & John C. B. Papaloizou (1999). “On the Dynamical Foundations of alpha Disks”. en. In: *ApJ* 521.2, S. 650. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1086/307594.
- Banerjee, Robi, Ralph E. Pudritz & Lindsay Holmes (2004). “The formation and evolution of protostellar discs; three-dimensional adaptive mesh refinement hydro simulations of collapsing, rotating Bonnor-Ebert spheres”. In: *MNRAS* 355, S. 248–272. ISSN: 0035-8711. DOI: 10.1111/j.1365-2966.2004.08316.x.
- Bergin, E. A. & E. F. van Dishoeck (2012). “Water in star- and planet-forming regions”. In: *RSPTA* 370, S. 2778–2802. ISSN: 0962-8436. DOI: 10.1098/rsta.2011.0301;.
- Bergin, E. A. et al. (2010). “Sensitive limits on the abundance of cold water vapor in the DM Tauri protoplanetary disk”. In: *A&A* 521, S. L33. ISSN: 0004-6361, 1432-0746. DOI: 10.1051/0004-6361/201015104.

- Beringer, J. et al. (2012). “Review of Particle Physics”. In: *PhRvD* 86.1, S. 010001. DOI: 10.1103/PhysRevD.86.010001.
- Bitsch, B., A. Crida, A. Morbidelli, W. Kley & I. Dobbs-Dixon (2013). “Stellar irradiated discs and implications on migration of embedded planets”. In: *A&A* 549, A124. ISSN: 0004-6361, 1432-0746. DOI: 10.1051/0004-6361/201220159.
- Bitsch, Bertram, Anders Johansen, Michiel Lambrechts & Alessandro Morbidelli (2014). “The structure of protoplanetary discs around evolving young stars”. In: *ArXiv* 1411, S. 3255.
- Blum, Jürgen & Gerhard Wurm (2008). “The Growth Mechanisms of Macroscopic Bodies in Protoplanetary Disks”. In: *ARA&A* 46.1, S. 21–56. DOI: 10.1146/annurev.astro.46.060407.145152.
- Bond, Jade C., Dante S. Lauretta & David P. O’Brien (2010a). “Making the Earth: Combining dynamics and chemistry in the Solar System”. In: *Icarus* 205.2, S. 321–337. ISSN: 0019-1035. DOI: 10.1016/j.icarus.2009.07.037.
- Bond, Jade C., David P. O’Brien & Dante S. Lauretta (2010b). “The Compositional Diversity of Extrasolar Terrestrial Planets. I. In Situ Simulations”. en. In: *ApJ* 715.2, S. 1050. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1088/0004-637X/715/2/1050.
- Bonnor, W. B. (1956). “Boyle’s Law and gravitational instability”. In: *MNRAS* 116, S. 351. ISSN: 0035-8711.
- Boss, Alan P. (1997). “Evolution of the Solar Nebula. III. Protoplanetary Disks Undergoing Mass Accretion: Erratum”. In: *ApJ* 478, S. 828.
- (2005). “Evolution of the Solar Nebula. VII. Formation and Survival of Protoplanets Formed by Disk Instability”. In: *ApJ* 629, S. 535–548.
- Bottke, William F., David Vokrouhlický, David Minton, David Nesvorný, Alessandro Morbidelli, Ramon Brasser, Bruce Simonson & Harold F. Levison (2012). “An Archaean heavy bombardment from a destabilized extension of the asteroid belt”. en. In: *Nature* 485.7396, S. 78–81. ISSN: 0028-0836. DOI: 10.1038/nature10967.
- Brasser, R. & A. Morbidelli (2013). “Oort cloud and Scattered Disc formation during a late dynamical instability in the Solar System”. In: *Icarus* 225.1, S. 40–49. ISSN: 0019-1035. DOI: 10.1016/j.icarus.2013.03.012.
- Bromm, Volker, Paolo S. Coppi & Richard B. Larson (2002). “The Formation of the First Stars. I. The Primordial Star-forming Cloud”. en. In: *ApJ* 564.1, S. 23. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1086/323947.
- Brown, Harrison (1949). “Rare Gases and the Formation of the Earth’s Atmosphere”. In: S. 258.
- Brown, P., G. Byrne & A. Hindmarsh (1989). “VODE: A Variable-Coefficient ODE Solver”. In: *SJSC* 10.5, S. 1038–1051. ISSN: 0196-5204. DOI: 10.1137/0910062.

- Brown, Peter N. & Alan C. Hindmarsh (1989). “Reduced storage matrix methods in stiff ODE systems”. In: *ApMaC*. Special Issue Numerical Ordinary Differential Equations (Proceedings of the 1986 ODE Conference) 31, S. 40–91. ISSN: 0096-3003. DOI: 10.1016/0096-3003(89)90110-0.
- Brož, M., A. Morbidelli, W. F. Bottke, J. Rozehnal, D. Vokrouhlický & D. Nesvorný (2013). “Constraining the cometary flux through the asteroid belt during the late heavy bombardment”. In: *A&A* 551, A117. ISSN: 0004-6361, 1432-0746. DOI: 10.1051/0004-6361/201219296.
- Carr, John S. & Joan R. Najita (2008). “Organic Molecules and Water in the Planet Formation Region of Young Circumstellar Disks”. en. In: *Science* 319.5869, S. 1504–1506. ISSN: 0036-8075, 1095-9203. DOI: 10.1126/science.1153807.
- Casassus, Simon, Gerrit van der Plas, Sebastian Perez M, William R. F. Dent, Ed Formalont, Janis Hagelberg, Antonio Hales, Andrés Jordán, Dimitri Mawet, Francois Ménard, Al Wootten, David Wilner, A. Meredith Hughes, Matthias R. Schreiber, Julien H. Girard, Barbara Ercolano, Hector Canovas, Pablo E. Román & Vachail Salinas (2013). “Flows of gas through a protoplanetary gap”. en. In: *Nature* 493.7431, S. 191–194. ISSN: 0028-0836. DOI: 10.1038/nature11769.
- Caselli, P., C. M. Walmsley, R. Terzieva & Eric Herbst (1998). “The Ionization Fraction in Dense Cloud Cores”. en. In: *ApJ* 499.1, S. 234. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1086/305624.
- Caselli, Paola & Cecilia Ceccarelli (2012). “Our astrochemical heritage”. en. In: *A&ARv* 20.1, S. 1–68. ISSN: 0935-4956, 1432-0754. DOI: 10.1007/s00159-012-0056-x.
- Caselli, Paola, Eric Keto, Edwin A. Bergin, Mario Tafalla, Yuri Aikawa, Thomas Douglas, Laurent Pagani, Umut A. Yıldız, Floris F. S. van der Tak, C. Malcolm Walmsley, Claudio Codella, Brunella Nisini, Lars E. Kristensen & Ewine F. van Dishoeck (2012). “First Detection of Water Vapor in a Pre-stellar Core”. In: *ApJ* 759.2, S. L37. ISSN: 2041-8205, 2041-8213. DOI: 10.1088/2041-8205/759/2/L37.
- Chastaing, Delphine, Philip L. James, Ian R. Sims & Ian W. M. Smith (1999). “Neutral-neutral reactions at the temperatures of interstellar clouds: Rate coefficients for reactions of atomic carbon, C(3P), with O<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> and C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> down to 15 K”. en. In: *PCCP* 1.9, S. 2247–2256. ISSN: 1463-9084. DOI: 10.1039/A900449A.
- Clark, Roger N., Robert Carlson, Will Grundy & Keith Noll (2013). “Observed Ices in the Solar System”. In: *The Science of Solar System Ices*, S. 3.
- Clarke, Cathie & Bob Carswell (2007). *Principles of Astrophysical Fluid Dynamics*. Cambridge University Press.

- Cleeves, L. Ilse, Fred C. Adams & Edwin A. Bergin (2013). “Exclusion of Cosmic Rays in Protoplanetary Disks: Stellar and Magnetic Effects”. en. In: *ApJ* 772.1, S. 5. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1088/0004-637X/772/1/5.
- Cleeves, L. Ilse, Edwin A. Bergin, Conel M. O’D Alexander, Fujun Du, Dawn Graninger, Karin I. Öberg & Tim J. Harries (2014). “The ancient heritage of water ice in the solar system”. en. In: *Science* 345.6204, S. 1590–1593. ISSN: 0036-8075, 1095-9203. DOI: 10.1126/science.1258055.
- Combet, C. & J. Ferreira (2008). “The radial structure of protostellar accretion disks: influence of jets”. In: *A&A* 479, S. 481–491. ISSN: 0004-6361. DOI: 10.1051/0004-6361:20078734;.
- Connelly, James N., Martin Bizzarro, Alexander N. Krot, Ake Nordlund, Daniel Wiegand & Marina A. Ivanova (2012). “The Absolute Chronology and Thermal Processing of Solids in the Solar Protoplanetary Disk”. en. In: *Science* 338.6107, S. 651–655. ISSN: 0036-8075, 1095-9203. DOI: 10.1126/science.1226919.
- Coutens, A., C. Vastel, E. Caux, C. Ceccarelli, S. Bottinelli, L. Wiesenfeld, A. Faure, Y. Scribano & C. Kahane (2012). “A study of deuterated water in the low-mass protostar IRAS 16293-2422”. In: *A&A* 539, A132. ISSN: 0004-6361. DOI: 10.1051/0004-6361/201117627.
- Coutens, A., C. Vastel, S. Cazaux, S. Bottinelli, E. Caux, C. Ceccarelli, K. Demyk, V. Taquet & V. Wakelam (2013). “Heavy water stratification in a low-mass protostar”. In: *A&A* 553, S. 75. ISSN: 0004-6361. DOI: 10.1051/0004-6361/201220967;.
- Crida, Aurélien (2009). “Minimum Mass Solar Nebulae and Planetary Migration”. en. In: *ApJ* 698.1, S. 606. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1088/0004-637X/698/1/606.
- Cuppen, H. M. & Eric Herbst (2007). “Simulation of the Formation and Morphology of Ice Mantles on Interstellar Grains”. en. In: *ApJ* 668.1, S. 294. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1086/521014.
- Cuzzi, Jeffrey N., Anthony R. Dobrovolskis & Joelle M. Champney (1993). “Particle-Gas Dynamics in the Midplane of a Protoplanetary Nebula”. In: *Icarus* 106.1, S. 102–134. ISSN: 0019-1035. DOI: 10.1006/icar.1993.1161.
- D’Alessio, Paola, Nuria Calvet & Lee Hartmann (2001). “Accretion Disks around Young Objects. III. Grain Growth”. In: *ApJ* 553, S. 321–334. DOI: 10.1086/320655.
- D’Alessio, Paola, Jorge Canto, Nuria Calvet & Susana Lizano (1998). “Accretion Disks around Young Objects. I. The Detailed Vertical Structure”. In: *ApJ* 500, S. 411. DOI: 10.1086/305702.
- Dauphas, Nicolas & Marc Chaussidon (2011). “A Perspective from Extinct Radionuclides on a Young Stellar Object: The Sun and Its Accretion Disk”. In: *AREPS* 39.1, S. 351–386. DOI: 10.1146/annurev-earth-040610-133428.

- Dell'Omodarme, M., G. Valle, S. Degl'Innocenti & P. G. Prada Moroni (2012). "The Pisa Stellar Evolution Data Base for low-mass stars". In: *A&A* 540, A26. ISSN: 0004-6361, 1432-0746. DOI: 10.1051/0004-6361/201118632.
- Dirks, U., V. Schirrmacher & E. Sedlmayr (2008). "Astrophysical dust formation under the influence of temperature fluctuations". In: *A&A* 491.3, S. 643–662. ISSN: 0004-6361, 1432-0746. DOI: 10.1051/0004-6361:20079243.
- Dishoeck, Ewine F. van, Bastiaan Jonkheid & Marc C. van Hemert (2006). "Photoprocesses in protoplanetary disks". en. In: *FaDi* 133, S. 231–243. ISSN: 1364-5498. DOI: 10.1039/B517564J.
- Dodson-Robinson, Sarah E., Karen Willacy, Peter Bodenheimer, Neal J. Turner & Charles A. Beichman (2009). "Ice lines, planetesimal composition and solid surface density in the solar nebula". In: *Icarus* 200.2, S. 672–693. ISSN: 0019-1035. DOI: 10.1016/j.icarus.2008.11.023.
- Draine, B.T. (2003). "Interstellar Dust Grains". In: *ARA&A* 41.1, S. 241–289. DOI: 10.1146/annurev.astro.41.011802.094840.
- Drake, Michael J. (2005). "Origin of water in the terrestrial planets". en. In: *M&PS* 40.4, S. 519–527. ISSN: 1945-5100. DOI: 10.1111/j.1945-5100.2005.tb00960.x.
- Drake, Michael J. & Kevin Righter (2002). "Determining the composition of the Earth". en. In: *Nature* 416.6876, S. 39–44. ISSN: 0028-0836. DOI: 10.1038/416039a.
- Du, Fujun & Edwin A. Bergin (2014). "Water Vapor Distribution in Protoplanetary Disks". en. In: *ApJ* 792.1, S. 2. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1088/0004-637X/792/1/2.
- Elser, S., M.R. Meyer & B. Moore (2012). "On the origin of elemental abundances in the terrestrial planets". In: *Icarus* 221.2, S. 859–874. ISSN: 0019-1035. DOI: 10.1016/j.icarus.2012.09.016.
- Emel'yanenko, V. V., D. J. Asher & M. E. Bailey (2013). "A Model for the Common Origin of Jupiter Family and Halley Type Comets". en. In: *EM&P* 110.1-2, S. 105–130. ISSN: 0167-9295, 1573-0794. DOI: 10.1007/s11038-012-9413-z.
- Epstein, Richard I., James M. Lattimer & David N. Schramm (1976). "The origin of deuterium". en. In: *Nature* 263.5574, S. 198–202. DOI: 10.1038/263198a0.
- Fahr, Hansjörg (1981). "Die Bildung des Sonnensystems: Versuch einer Deutung". en. In: *Phys. Bl.* 37.6, S. 142–149. ISSN: 1521-3722. DOI: 10.1002/phb1.19810370606.
- Farihi, J., B. T. Gänsicke & D. Koester (2013). "Evidence for Water in the Rocky Debris of a Disrupted Extrasolar Minor Planet". en. In: *Science* 342.6155, S. 218–220. ISSN: 0036-8075, 1095-9203. DOI: 10.1126/science.1239447.
- Feigelson, Eric D. & Thierry Montmerle (1999). "High-Energy Processes in Young Stellar Objects". In: *ARA&A* 37.1, S. 363–408. DOI: 10.1146/annurev.astro.37.1.363.

- Fogel, Jeffrey K. J., Thomas J. Bethell, Edwin A. Bergin, Nuria Calvet & Dmitry Semenov (2011). “Chemistry of a Protoplanetary Disk with Grain Settling and Ly-alpha Radiation”. en. In: *ApJ* 726.1, S. 29. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1088/0004-637X/726/1/29.
- Fromang, S., W. Lyra & F. Masset (2011). “Meridional circulation in turbulent protoplanetary disks”. In: *A&A* 534, A107. ISSN: 0004-6361, 1432-0746. DOI: 10.1051/0004-6361/201016068.
- Furuya, Kenji, Yuri Aikawa, Hideko Nomura, Franck Hersant & Valentine Wakelam (2013). “Water in Protoplanetary Disks: Deuteration and Turbulent Mixing”. en. In: *ApJ* 779.1, S. 11. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1088/0004-637X/779/1/11.
- Galli, Daniele, Francesco Palla, Federico Ferrini & Umberto Penco (1995). “Galactic evolution of D and He-3”. In: *ApJ* 443, S. 536–550. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1086/175546.
- Genda, Hidenori & Yutaka Abe (2003). “Survival of a proto-atmosphere through the stage of giant impacts: the mechanical aspects”. In: *Icarus* 164.1, S. 149–162. ISSN: 0019-1035. DOI: 10.1016/S0019-1035(03)00101-5.
- (2005). “Enhanced atmospheric loss on protoplanets at the giant impact phase in the presence of oceans”. en. In: *Nature* 433.7028, S. 842–844. ISSN: 0028-0836. DOI: 10.1038/nature03360.
- Gibb, E. L., D. C. B. Whittet, A. C. A. Boogert & A. G. G. M. Tielens (2004). “Interstellar Ice: The Infrared Space Observatory Legacy”. en. In: *ApJS* 151.1, S. 35. ISSN: 0067-0049. DOI: 10.1086/381182.
- Gillespie, Daniel T. (2007). “Stochastic Simulation of Chemical Kinetics”. In: *ARPC* 58.1, S. 35–55. DOI: 10.1146/annurev.physchem.58.032806.104637.
- Goldsmith, Paul F. (2001). “Molecular Depletion and Thermal Balance in Dark Cloud Cores”. en. In: *ApJ* 557.2, S. 736. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1086/322255.
- Gong, Hao & Eve C. Ostriker (2009). “Protostar Formation in Supersonic Flows: Growth and Collapse of Spherical Cores”. en. In: *ApJ* 699.1, S. 230. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1088/0004-637X/699/1/230.
- Gorti, U., C. P. Dullemond & D. Hollenbach (2009). “Time Evolution of Viscous Circumstellar Disks due to Photoevaporation by Far-Ultraviolet, Extreme-Ultraviolet, and X-ray Radiation from the Central Star”. en. In: *ApJ* 705.2, S. 1237. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1088/0004-637X/705/2/1237.
- Gradie, Jonathan C., Clark R. Chapman & Edward F. Tedesco (1989). “Distribution of taxonomic classes and the compositional structure of the asteroid belt”. In: S. 316–335.

- Graedel, T. E., W. D. Langer & M. A. Frerking (1982). “The kinetic chemistry of dense interstellar clouds”. In: *The Astrophysical Journal Supplement Series* 48, S. 321–368. ISSN: 0067-0049. DOI: 10.1086/190780.
- Greenwood, James P., Shoichi Itoh, Naoya Sakamoto, Paul Warren, Lawrence Taylor & Hisayoshi Yurimoto (2011). “Hydrogen isotope ratios in lunar rocks indicate delivery of cometary water to the Moon”. en. In: *NatGe* 4.2, S. 79–82. ISSN: 1752-0894. DOI: 10.1038/ngeo1050.
- Hairer, Ernst (1996). *Solving Ordinary Differential Equations II: Stiff and Differential-Algebraic Problems*. en. Springer. ISBN: 9783540604525.
- Hansen, Brad M. S. (2009). “Formation of the Terrestrial Planets from a Narrow Annulus”. en. In: *ApJ* 703.1, S. 1131. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1088/0004-637X/703/1/1131.
- Hartmann, Lee (2000). *Accretion Processes in Star Formation*. en. Cambridge University Press. ISBN: 9780521785204.
- (2002). “Flows, Fragmentation, and Star Formation. I. Low-Mass Stars in Taurus”. en. In: *ApJ* 578.2, S. 914. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1086/342657.
- Hartogh, Paul, Dariusz C. Lis, Dominique Bockelee-Morvan, Miguel de Val-Borro, Nicolas Biver, Michael Kuppers, Martin Emprechtinger, Edwin A. Bergin, Jacques Crovisier, Miriam Rengel, Raphael Moreno, Slawomira Szutowicz & Geoffrey A. Blake (2011). “Ocean-like water in the Jupiter-family comet 103P/Hartley 2”. In: *Nature* 478.7368, S. 218–220. ISSN: 0028-0836. DOI: 10.1038/nature10519.
- Hasegawa, Tatsuhiko I. & Eric Herbst (1993). “Three-phase chemical models of dense interstellar clouds: gas, dust particle mantles and dust particle surfaces”. en. In: *MNRAS* 263.3, S. 589–606. ISSN: 0035-8711, 1365-2966. DOI: 10.1093/mnras/263.3.589.
- Hasegawa, Tatsuhiko I., Eric Herbst & Chun M. Leung (1992). “Models of gas-grain chemistry in dense interstellar clouds with complex organic molecules”. In: *The Astrophysical Journal Supplement Series* 82, S. 167–195. ISSN: 0067-0049. DOI: 10.1086/191713.
- Heinzeller, D., H. Nomura, C. Walsh & T. J. Millar (2011). “Chemical Evolution of Protoplanetary Disks - The Effects of Viscous Accretion, Turbulent Mixing, and Disk Winds”. en. In: *ApJ* 731.2, S. 115. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1088/0004-637X/731/2/115.
- Henning, Thomas & Dmitry Semenov (2013). “Chemistry in Protoplanetary Disks”. In: *ChRv* 113.12, S. 9016–9042. ISSN: 0009-2665. DOI: 10.1021/cr400128p.



- Henry, R. B. C. & Guy Worthey (1999). “The Distribution of Heavy Elements in Spiral and Elliptical Galaxies”. In: *PASP* 111.762, S. 919–945. ISSN: 0004-6280. DOI: 10.1086/pasp.1999.111.issue-762.
- Herbig, G. H. & Robert W. Goodrich (1986). “Near-simultaneous ultraviolet and optical spectrophotometry of T Tauri stars”. In: *ApJ* 309, S. 294–305. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1086/164600.
- Herbst, Eric (2001). “The chemistry of interstellar space”. In: *CSRv* 30.3, S. 168–176. ISSN: 03060012. DOI: 10.1039/a909040a.
- Herbst, Eric & Ewine F. van Dishoeck (2009). “Complex Organic Interstellar Molecules”. In: *ARA&A* 47, S. 427–480. ISSN: 0066-4146, 1545-4282. DOI: 10.1146/annurev-astro-082708-101654.
- Hersant, Franck, Daniel Gautier & Jean-Marc Huré (2001). “A Two-dimensional Model for the Primordial Nebula Constrained by D/H Measurements in the Solar System: Implications for the Formation of Giant Planets”. en. In: *ApJ* 554.1, S. 391. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1086/321355.
- Hincelin, U., V. Wakelam, B. Commerçon, F. Hersant & S. Guilloteau (2013). “Survival of Interstellar Molecules to Prestellar Dense Core Collapse and Early Phases of Disk Formation”. en. In: *ApJ* 775.1, S. 44. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1088/0004-637X/775/1/44.
- Hinshaw, G. et al. (2009). “Five-Year Wilkinson Microwave Anisotropy Probe Observations: Data Processing, Sky Maps, and Basic Results”. en. In: *ApJS* 180.2, S. 225. ISSN: 0067-0049. DOI: 10.1088/0067-0049/180/2/225.
- Hogerheijde, Michiel R., Edwin A. Bergin, Christian Brinch, L. Ilse de Cleves, Jeffrey K. J. Fogel, Geoffrey A. Blake, Carsten Dominik, Dariusz C. Lis, Gary Melnick, David Neufeld, Olja Panić, John C. Pearson, Lars Kristensen, Umut A. Yıldız & Ewine F. van Dishoeck (2011). “Detection of the Water Reservoir in a Forming Planetary System”. en. In: *Science* 334.6054, S. 338–340. ISSN: 0036-8075, 1095-9203. DOI: 10.1126/science.1208931.
- Hollenbach, D. J. & A. G. G. M. Tielens (1999). “Photodissociation regions in the interstellar medium of galaxies”. In: *Rev. Mod. Phys.* 71.1, S. 173–230. DOI: 10.1103/RevModPhys.71.173.
- Ilee, J. D., A. C. Boley, P. Caselli, R. H. Durisen, T. W. Hartquist & J. M. C. Rawlings (2011). “Chemistry in a gravitationally unstable protoplanetary disc”. en. In: *MNRAS* 417.4, S. 2950–2961. ISSN: 0035-8711, 1365-2966. DOI: 10.1111/j.1365-2966.2011.19455.x.

- Ilgner, M. & R. P. Nelson (2008). “Turbulent transport and its effect on the dead zone in protoplanetary discs”. In: *A&A* 483.3, S. 815–830. ISSN: 0004-6361. DOI: 10.1051/0004-6361/20079307.
- Jacquet, E. (2013). “On vertical variations of gas flow in protoplanetary disks and their impact on the transport of solids”. In: *A&A* 551, A75. ISSN: 0004-6361, 1432-0746. DOI: 10.1051/0004-6361/201220812.
- Johansson, Erik P. G. & Udo Ziegler (2013). “Radiative Interaction of Shocks with Small Interstellar Clouds as a Pre-stage to Star Formation”. en. In: *ApJ* 766.1, S. 45. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1088/0004-637X/766/1/45.
- Katz, N., I. Furman, O. Biham, V. Pirronello & G. Vidali (1999). “Molecular Hydrogen Formation on Astrophysically Relevant Surfaces”. en. In: *ApJ* 522.1, S. 305. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1086/307642.
- Kavelaars, J. J., Olivier Mousis, Jean-Marc Petit & Harold A. Weaver (2011). “On the Formation Location of Uranus and Neptune as Constrained by Dynamical and Chemical Models of Comets”. en. In: *ApJ* 734.2, S. L30. ISSN: 2041-8205. DOI: 10.1088/2041-8205/734/2/L30.
- Keto, Eric, Avery E. Broderick, Charles J. Lada & Ramesh Narayan (2006). “Oscillations of Starless Cores”. en. In: *ApJ* 652.2, S. 1366. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1086/508251.
- Kippenhahn, R. & A. Weigert (1990). *Stellar Structure and Evolution*. Springer. ISBN: 3-540-50211-4.
- Kirk, Helen, Doug Johnstone & James Di Francesco (2006). “The Large- and Small-Scale Structures of Dust in the Star-forming Perseus Molecular Cloud”. en. In: *ApJ* 646.2, S. 1009. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1086/503193.
- Koren, B. (1993). “A robust upwind discretization method for advection, diffusion and source terms”. en. In: *Notes on Numerical Fluid Mechanics*. Bd. 45. Vieweg, S. 117–138.
- Kotwicki, Vincent (2009). “Water balance of Earth / Bilan hydrologique de la Terre”. In: *Hydro Sci J* 54.5, S. 829–840. ISSN: 0262-6667. DOI: 10.1623/hysj.54.5.829.
- Kristensen, L. E. et al. (2012). “Water in star-forming regions with Herschel (WISH). II. Evolution of 557 GHz 110-101 emission in low-mass protostars”. In: *A&A* 542, A8. ISSN: 0004-6361. DOI: 10.1051/0004-6361/201118146.
- Kupper, Stefan (2014). “Einfluss der Staubeigenschaften auf das D/H Isotopenverhältnis und die Häufigkeiten wichtiger präbiotischer Spezies im Solaren Nebel”. de. Diss. TU Braunschweig.

- Kupper, Stefan, Carmen Tornow & Philipp Gast (2012). “Two Different Sources of Water for the Early Solar Nebula”. en. In: *OLeb* 42.2-3, S. 81–92. ISSN: 0169-6149, 1573-0875. DOI: 10.1007/s11084-012-9280-7.
- Kwon, Woojin, Leslie W. Looney & Lee G. Mundy (2011). “Resolving the Circumstellar Disk of HL Tauri at Millimeter Wavelengths”. en. In: *ApJ* 741.1, S. 3. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1088/0004-637X/741/1/3.
- Lada, Charles J. (1987). “Star formation - From OB associations to protostars”. In: Bd. 115, S. 1–17. ISBN: 1743-9221.
- Lada, Charles J., Edwin A. Bergin, João F. Alves & Tracy L. Huard (2003). “The Dynamical State of Barnard 68: A Thermally Supported, Pulsating Dark Cloud”. en. In: *ApJ* 586.1, S. 286. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1086/367610.
- Larsson, M., W. D. Geppert & G. Nyman (2012). “Ion chemistry in space”. en. In: *RPPh* 75.6, S. 066901. ISSN: 0034-4885. DOI: 10.1088/0034-4885/75/6/066901.
- Launhardt, R. et al. (2013). “The Earliest Phases of Star Formation (EPoS): a Herschel key project. The thermal structure of low-mass molecular cloud cores”. In: *A&A* 551, A98. ISSN: 0004-6361, 1432-0746. DOI: 10.1051/0004-6361/201220477.
- Lawrence, David J., William C. Feldman, John O. Goldsten, Sylvestre Maurice, Patrick N. Peplowski, Brian J. Anderson, David Bazell, Ralph L. McNutt, Larry R. Nittler, Thomas H. Prettyman, Douglas J. Rodgers, Sean C. Solomon & Shoshana Z. Weider (2013). “Evidence for Water Ice Near Mercury’s North Pole from MESSENGER Neutron Spectrometer Measurements”. en. In: *Science* 339.6117, S. 292–296. ISSN: 0036-8075, 1095-9203. DOI: 10.1126/science.1229953.
- Lécuyer, Christophe, Philippe Gillet & François Robert (1998). “The hydrogen isotope composition of seawater and the global water cycle”. In: *CheGeo* 145.3–4, S. 249–261. ISSN: 0009-2541. DOI: 10.1016/S0009-2541(97)00146-0.
- Lee, H.-H., E. Roueff, G. Pineau des Forets, O. M. Shalabiea, R. Terzieva & Eric Herbst (1998). “Bistability in large chemical networks: a global view”. In: *A&A* 334, S. 1047–1055. ISSN: 0004-6361.
- LeVeque, Randall J. (2002). *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. en. Cambridge University Press. ISBN: 9780521009249.
- Levison, Harold F., Alessandro Morbidelli, Kleomenis Tsiganis, David Nesvorný & Rodney Gomes (2011). “Late Orbital Instabilities in the Outer Planets Induced by Interaction with a Self-gravitating Planetesimal Disk”. en. In: *ApJ* 142.5, S. 152. ISSN: 1538-3881. DOI: 10.1088/0004-6256/142/5/152.
- Linsky, Jeffrey L. (2003). “Atomic Deuterium/Hydrogen in the Galaxy”. en. In: *SSRv* 106.1-4, S. 49–60. ISSN: 0038-6308, 1572-9672. DOI: 10.1023/A:1024673217736.

- Lis, D. C., N. Biver, D. Bockelée-Morvan, P. Hartogh, E. A. Bergin, G. A. Blake, J. Crovisier, M. de Val-Borro, E. Jehin, M. Küppers, J. Manfroid, R. Moreno, M. Rengel & S. Szutowicz (2013). “A Herschel Study of D/H in Water in the Jupiter-family Comet 45P/Honda-Mrkos-Pajdušáková and Prospects for D/H Measurements with CCAT”. en. In: *ApJ* 774.1, S. L3. ISSN: 2041-8205. DOI: 10.1088/2041-8205/774/1/L3.
- Lynden-Bell, D. & J. E. Pringle (1974). “The evolution of viscous discs and the origin of the nebular variables.” In: *MNRAS* 168, S. 603–637.
- Makalkin, A. B. & V. A. Dorofeeva (2009). “Temperature distribution in the solar nebula at successive stages of its evolution”. In: *SoSyR* 43.6, S. 508–532. ISSN: 0038-0946, 1608-3423. DOI: 10.1134/S0038094609060070.
- Markwardt, C. B. (2009). “Non-linear Least-squares Fitting in IDL with MPFIT”. In: Bd. 411. eprint: arXiv:0902.2850, S. 251. ISBN: 1050-3390.
- Marty, Bernard, Conel M. O’D Alexander & Sean N. Raymond (2013). “Primordial Origins of Earth’s Carbon”. en. In: *RvMin* 75.1, S. 149–181. ISSN: 1529-6466, DOI: 10.2138/rmg.2013.75.6.
- Mathis, J. S., W. Rumpl & K. H. Nordsieck (1977). “The size distribution of interstellar grains”. In: *ApJ* 217, S. 425–433. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1086/155591.
- Matsumura, Soko & Ralph E. Pudritz (2003). “The Origin of Jovian Planets in Protostellar Disks: The Role of Dead Zones”. en. In: *ApJ* 598.1, S. 645. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1086/378846.
- Min, M., C.P. Dullemond, M. Kama & C. Dominik (2011). “The thermal structure and the location of the snow line in the protosolar nebula: Axisymmetric models with full 3-D radiative transfer”. In: *Icarus* 212.1, S. 416–426. ISSN: 0019-1035. DOI: 10.1016/j.icarus.2010.12.002.
- Mönmeyer, R. & E. Müller (1989). “A Conservative Second-Order Difference Scheme for Curvilinear Coordinates - Part One - Assignment of Variables on a Staggered Grid”. In: *A&A* 217, S. 351. ISSN: 0004-6361.
- Montmerle, Thierry, Jean-Charles Augereau, Marc Chaussidon, Matthieu Gounelle, Bernard Marty & Alessandro Morbidelli (2006). “Solar System Formation and Early Evolution: the First 100 Million Years”. en. In: *From Suns to Life: A Chronological Approach to the History of Life on Earth*. Hrsg. von Muriel Gargaud, Philippe Claeys, Purificación López-García, Hervé Martin, Thierry Montmerle, Robert Pascal & Jacques Reisse. Springer New York, S. 39–95. ISBN: 978-0-387-45082-7, 978-0-387-45083-4.
- Morbidelli, A., J. Chambers, J. I. Lunine, J. M. Petit, F. Robert, G. B. Valsecchi & K. E. Cyr (2000). “Source regions and timescales for the delivery of water to the

- Earth”. en. In: *M&PS* 35.6, S. 1309–1320. ISSN: 1945-5100. DOI: 10.1111/j.1945-5100.2000.tb01518.x.
- Morbidelli, A., V. V. Emel’yanenko & H. F. Levison (2004). “Origin and orbital distribution of the trans-Neptunian scattered disc”. en. In: *MNRAS* 355.3, S. 935–940. ISSN: 0035-8711, 1365-2966. DOI: 10.1111/j.1365-2966.2004.08372.x.
- Mothé-Diniz, Thais, Jorge M. árcio Carvano & Daniela Lazzaro (2003). “Distribution of taxonomic classes in the main belt of asteroids”. In: *Icarus* 162.1, S. 10–21. ISSN: 0019-1035. DOI: 10.1016/S0019-1035(02)00066-0.
- Müller, Holger S. P., Frank Schlöder, Jürgen Stutzki & Gisbert Winnewisser (2005). “The Cologne Database for Molecular Spectroscopy, CDMS: a useful tool for astronomers and spectroscopists”. In: *JMoSt*. Molecular Spectroscopy and Structure a Collection of Invited Papers in Honor of Dr. Walter J. Lafferty 742.1–3, S. 215–227. ISSN: 0022-2860. DOI: 10.1016/j.molstruc.2005.01.027.
- Mumma, Michael J. & Steven B. Charnley (2011). “The Chemical Composition of Comets - Emerging Taxonomies and Natal Heritage”. In: *ARA&A* 49.1, S. 471–524. ISSN: 0066-4146, 1545-4282. DOI: 10.1146/annurev-astro-081309-130811.
- Nielbock, Markus (2001). “Physical properties of protostars”. Diss. Bochum: Ruhr-Universität Bochum.
- Niem, D. de, E. Kürt, A. Morbidelli & U. Motschmann (2012). “Atmospheric erosion and replenishment induced by impacts upon the Earth and Mars during a heavy bombardment”. In: *Icarus* 221.2, S. 495–507. ISSN: 0019-1035. DOI: 10.1016/j.icarus.2012.07.032.
- Öberg, K. I., E. F. van Dishoeck & H. Linnartz (2009a). “Photodesorption of ices I: CO, N<sub>2</sub>, and CO<sub>2</sub>”. In: *A&A* 496. <http://www.aanda.org/articles/aa/abs/2009/10/aa10207-08/aa10207-08.html>, S. 281–293. ISSN: 0004-6361. DOI: 10.1051/0004-6361/200810207.
- Öberg, Karin I., Harold Linnartz, Ruud Visser & Ewine F. van Dishoeck (2009b). “Photodesorption of Ices. II. H<sub>2</sub>O and D<sub>2</sub>O”. en. In: *ApJ* 693.2, S. 1209. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1088/0004-637X/693/2/1209.
- Öberg, Karin I., Chunhua Qi, David J. Wilner & Michiel R. Hogerheijde (2012). “Evidence for Multiple Pathways to Deuterium Enhancements in Protoplanetary Disks”. en. In: *ApJ* 749.2, S. 162. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1088/0004-637X/749/2/162.
- O’Brien, David P., Kevin J. Walsh, Alessandro Morbidelli, Sean N. Raymond & Avi M. Mandell (2014). “Water delivery and giant impacts in the ‘Grand Tack’ scenario”. In: *Icarus* 239, S. 74–84. ISSN: 0019-1035. DOI: 10.1016/j.icarus.2014.05.009.
- Ohtani, Eiji (2005). “Water in the Mantle”. en. In: *Elements* 1.1, S. 25–30. ISSN: 1811-5209, 1811-5217. DOI: 10.2113/gselements.1.1.25.

- Oran, Elaine S. & Jay P. Boris (2005). *Numerical Simulation of Reactive Flow*. en. Cambridge University Press. ISBN: 9780521022361.
- Persson, M. V., J. K. Jørgensen, E. F. van Dishoeck & D. Harsono (2014). “The deuterium fractionation of water on solar-system scales in deeply-embedded low-mass protostars”. In: *A&A* 563, A74. ISSN: 0004-6361. DOI: 10.1051/0004-6361/201322845.
- Pfalzner, S. (2013). “Early evolution of the birth cluster of the solar system”. In: *A&A* 549, A82. ISSN: 0004-6361, 1432-0746. DOI: 10.1051/0004-6361/201218792.
- Pollack, James B., David Hollenbach, Steven Beckwith, Damon P. Simonelli, Ted Roush & Wesley Fong (1994). “Composition and radiative properties of grains in molecular clouds and accretion disks”. In: *ApJ* 421, S. 615–639. DOI: DOI:10.1086/173677.
- Press, William H., Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling & Brian P. Flannery (1992). *Numerical recipes in FORTRAN. The art of scientific computing*.
- Pringle, J E (1981). “Accretion Discs in Astrophysics”. In: *ARA&A* 19, S. 137–160. ISSN: 0066-4146, 1545-4282. DOI: 10.1146/annurev.aa.19.090181.001033.
- Pudritz, R. E., R. Ouyed, Ch. Fendt & A. Brandenburg (2007). “Disk Winds, Jets, and Outflows: Theoretical and Computational Foundations”. In: *Protostars and Planets V*. Tucson: University of Arizona Press.
- Raymond, Sean N., Thomas Quinn & Jonathan I. Lunine (2007). “High-Resolution Simulations of The Final Assembly of Earth-Like Planets. 2. Water Delivery And Planetary Habitability”. In: *AsBio* 7.1, S. 66–84. ISSN: 1531-1074. DOI: 10.1089/ast.2006.06-0126.
- Raymond, Sean N., Hilke E. Schlichting, Franck Hersant & Franck Selsis (2013). “Dynamical and collisional constraints on a stochastic late veneer on the terrestrial planets”. In: *Icarus* 226.1, S. 671–681. ISSN: 0019-1035. DOI: 10.1016/j.icarus.2013.06.019.
- Regev, O. & G. Shaviv (1981). “Formation of protostars in collapsing, rotating, turbulent clouds”. In: *ApJ* 245, S. 934–959. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1086/158871.
- Robert, François (2006). “Solar System Deuterium/Hydrogen Ratio”. en. In: *Meteorites And the Early Solar System II*. University of Arizona Press, S. 992. ISBN: 9780816525621.
- Roberts, Helen, Eric Herbst & T. J. Millar (2003). “Enhanced Deuterium Fractionation in Dense Interstellar Cores Resulting from Multiply Deuterated H+3”. In: *ApJ* 591, S. L41–L44. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1086/376962.
- Rowles, Jonathan & Dirk Froebrich (2011). “The structure of molecular clouds – III. A link between cloud structure and star formation mode”. en. In: *MNRAS* 416.1, S. 294–301. ISSN: 0035-8711, 1365-2966. DOI: 10.1111/j.1365-2966.2011.19036.x.

- Saigo, Kazuya, Kohji Tomisaka & Tomoaki Matsumoto (2008). “Evolution of First Cores and Formation of Stellar Cores in Rotating Molecular Cloud Cores”. In: *ApJ* 674, S. 997–1014. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1086/523888.
- Sano, Takayoshi, Shoken M. Miyama, Toyoharu Umebayashi & Takenori Nakano (2000). “Magnetorotational Instability in Protoplanetary Disks. II. Ionization State and Unstable Regions”. en. In: *ApJ* 543.1, S. 486. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1086/317075.
- Schöier, F. L., J. K. Jørgensen, E. F. van Dishoeck & G. A. Blake (2002). “Does IRAS 16293-2422 have a hot core? Chemical inventory and abundance changes in its protostellar environment”. In: *A&A* 390, S. 1001–1021. ISSN: 0004-6361. DOI: 10.1051/0004-6361:20020756.
- Schönke, J. & W. M. Tscharnuter (2011). “Protostellar collapse of rotating cloud cores”. In: *A&A* 526, A139. ISSN: 0004-6361, 1432-0746. DOI: 10.1051/0004-6361/201015734.
- Schwamb, Megan E., Michael E. Brown, David L. Rabinowitz & Darin Ragozzine (2010). “Properties of the Distant Kuiper Belt: Results from the Palomar Distant Solar System Survey”. en. In: *ApJ* 720.2, S. 1691. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1088/0004-637X/720/2/1691.
- Semenov, D. & D. Wiebe (2011). “Chemical Evolution of Turbulent Protoplanetary Disks and the Solar Nebula”. In: *ApJS* 196.2, S. 25. ISSN: 0067-0049, 1538-4365. DOI: 10.1088/0067-0049/196/2/25.
- Semenov, Dmitry A. (2005). “Dust and Gas in Protoplanetary Discs”. Diss. Friedrich-Schiller-Universität Jena.
- (2011). “Chemical Evolution of a Protoplanetary Disk”. In: *PIAU* 7.Symposium S280, S. 114–126. DOI: 10.1017/S1743921311024914.
- Shakura, N. I. & R. A. Sunyaev (1973). “Black holes in binary systems. Observational appearance.” In: *A&A* 24, S. 337–355. ISSN: 0004-6361.
- Shaw, Gargi, G. J. Ferland, R. Srianand, N. P. Abel, P. A. M. van Hoof & P. C. Stancil (2008). “On the Enhanced Cosmic-Ray Ionization Rate in the Diffuse Cloud toward Zeta Persei”. en. In: *ApJ* 675.1, S. 405. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1086/526395.
- Sipilä, O. (2012). “Radial molecular abundances and gas cooling in starless cores”. In: *A&A* 543, A38. ISSN: 0004-6361, 1432-0746. DOI: 10.1051/0004-6361/201219083.
- Sipilä, O., J. Harju & M. Juvela (2011). “On the stability of non-isothermal Bonnor-Ebert spheres”. In: *A&A* 535, A49. ISSN: 0004-6361, 1432-0746. DOI: 10.1051/0004-6361/201117547.
- Stahler, Steven W., D. G. Korycansky, Maxwell J. Brothers & Jihad Touma (1994). “The early evolution of protostellar disks”. In: *ApJ* 431, S. 341–358. DOI: DOI : 10.1086/174489.

- Takeuchi, Taku & Pawel Artymowicz (2001). “Dust Migration and Morphology in Optically Thin Circumstellar Gas Disks”. en. In: *ApJ* 557.2, S. 990. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1086/322252.
- Takeuchi, Taku & D. N. C. Lin (2002). “Radial Flow of Dust Particles in Accretion Disks”. In: *ApJ* 581.2, S. 1344–1355. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1086/344437.
- Taquet, V., A. López-Sepulcre, C. Ceccarelli, R. Neri, C. Kahane, A. Coutens & C. Vastel (2013a). “Water Deuterium Fractionation in the Inner Regions of Two Solar-type Protostars”. en. In: *ApJ* 768.2, S. L29. ISSN: 2041-8205. DOI: 10.1088/2041-8205/768/2/L29.
- Taquet, V., P. S. Peters, C. Kahane, C. Ceccarelli, A. López-Sepulcre, C. Toubin, D. Dufflot & L. Wiesenfeld (2013b). “Water ice deuteration: a tracer of the chemical history of protostars”. In: *A&A* 550, A127. ISSN: 0004-6361, 1432-0746. DOI: 10.1051/0004-6361/201220084.
- Taquet, Vianney, Steven B. Charnley & Olli Sipilä (2014). “Multilayer Formation and Evaporation of Deuterated Ices in Prestellar and Protostellar Cores”. en. In: *ApJ* 791.1, S. 1. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1088/0004-637X/791/1/1.
- Toomre, A. (1964). “On the gravitational stability of a disk of stars”. In: *ApJ* 139, S. 1217–1238. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1086/147861.
- Tornow, C., P. Gast, U. Motschmann, S. Kupper, E. Kührt & I. Pelivan (2013a). “Water formation in early solar nebula: II. Collapsing cloud core”. In: *P&SS* 98, S. 233–253. ISSN: 0032-0633. DOI: 10.1016/j.pss.2013.12.009.
- Tornow, C., P. Gast, I. Pelivan, S. Kupper, E. Kührt & U. Motschmann (2013b). “Water formation in early solar nebula: I. Quasi-stationary cloud core”. In: *P&SS* 98, S. 216–232. ISSN: 0032-0633. DOI: 10.1016/j.pss.2013.12.010.
- (2014). “Simulating the D/H ratio of water formed in the early solar nebula”. In: *Geochimica et Cosmochimica Acta* 48.6, S. 527–547. DOI: 10.2343/geochemj.2.0348.
- Tscharnutter, W. M. & H.-P. Gail (2007). “2-D preplanetary accretion disks”. In: *A&A* 463.1, S. 369–392. ISSN: 0004-6361, 1432-0746. DOI: 10.1051/0004-6361:20065794.
- Tscharnutter, W. M., J. Schönke, H.-P. Gail, M. Tieloff & E. Lüttjohann (2009). “Protostellar collapse: rotation and disk formation”. In: *A&A* 504.1, S. 109–113. ISSN: 0004-6361, 1432-0746. DOI: 10.1051/0004-6361/200912120.
- Umebayashi, T. & T. Nakano (1981). “Fluxes of Energetic Particles and the Ionization Rate in Very Dense Interstellar Clouds”. In: *PASJ* 33, S. 617. ISSN: 0004-6264.
- Umebayashi, Toyoharu & Takenori Nakano (2009). “Effects of Radionuclides on the Ionization State of Protoplanetary Disks and Dense Cloud Cores”. In: *ApJ* 690, S. 69–81. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1088/0004-637X/690/1/69.



- Vasyunin, A. I., D. Semenov, Th. Henning, V. Wakelam, Eric Herbst & A. M. Sobolev (2008). “Chemistry in Protoplanetary Disks: A Sensitivity Analysis”. In: *ApJ* 672.1, S. 629–641. ISSN: 0004-637X, 1538-4357. DOI: 10.1086/523887.
- Villanueva, G. L., M. J. Mumma, R. E. Novak, H. U. Käuffl, P. Hartogh, T. Encrenaz, A. Tokunaga, A. Khayat & M. D. Smith (2015). “Strong water isotopic anomalies in the martian atmosphere: Probing current and ancient reservoirs”. en. In: *Science*, aaa3630. ISSN: 0036-8075, 1095-9203. DOI: 10.1126/science.aaa3630.
- Visser, R., E. F. van Dishoeck, S. D. Doty & C. P. Dullemond (2009). “The chemical history of molecules in circumstellar disks”. In: *A&A* 495.3, S. 881–897. ISSN: 0004-6361, 1432-0746. DOI: 10.1051/0004-6361/200810846.
- Visser, R., S. D. Doty & E. F. van Dishoeck (2011). “The chemical history of molecules in circumstellar disks”. In: *A&A* 534, A132. ISSN: 0004-6361, 1432-0746. DOI: 10.1051/0004-6361/201117249.
- Wakelam, V., E. Herbst & F. Selsis (2006). “The effect of uncertainties on chemical models of dark clouds”. In: *A&A* 451, S. 551–562. ISSN: 0004-6361. DOI: 10.1051/0004-6361:20054682;.
- Wakelam, V., F. Selsis, E. Herbst & P. Caselli (2005). “Estimation and reduction of the uncertainties in chemical models: application to hot core chemistry”. In: *A&A* 444, S. 883–891. ISSN: 0004-6361. DOI: 10.1051/0004-6361:20053673.
- Wakelam, V., I. W. M. Smith, E. Herbst, J. Troe, W. Geppert, H. Linnartz, K. Öberg, E. Roueff, M. Agúndez, P. Pernot, H. M. Cuppen, J. C. Loison & D. Talbi (2010). “Reaction Networks for Interstellar Chemical Modelling: Improvements and Challenges”. en. In: *SSRv* 156.1-4, S. 13–72. ISSN: 0038-6308, 1572-9672. DOI: 10.1007/s11214-010-9712-5.
- Walker, R. J., M. F. Horan, J. W. Morgan, H. Becker, J. N. Grossman & A. E. Rubin (2002). “Comparative  $^{187}\text{Re}$ - $^{187}\text{Os}$  systematics of chondrites: Implications regarding early solar system processes”. In: *GeCoA* 66.23, S. 4187–4201. ISSN: 0016-7037. DOI: 10.1016/S0016-7037(02)01003-7.
- Walsh, Catherine, T. J. Millar & Hideko Nomura (2010). “Chemical Processes in Protoplanetary Disks”. en. In: *ApJ* 722.2, S. 1607. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1088/0004-637X/722/2/1607.
- Walsh, Catherine, Hideko Nomura, T. J. Millar & Yuri Aikawa (2012). “Chemical Processes in Protoplanetary Disks. II. On the Importance of Photochemistry and X-Ray Ionization”. en. In: *ApJ* 747.2, S. 114. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1088/0004-637X/747/2/114.

- Walsh, Kevin J., Alessandro Morbidelli, Sean N. Raymond, David P. O'Brien & Avi M. Mandell (2011). "A low mass for Mars from Jupiter's early gas-driven migration". In: *Nature* 475, S. 206–209. ISSN: 0028-0836. DOI: 10.1038/nature10201.
- Wehrstedt, Michael (2004). "2-dimensionaler Stofftransport in protoplanetaren Akkretionsscheiben". German. Diss. Heidelberg: Ruprecht - Karls - Universität.
- Weidenschilling, S. J. (1977). "Aerodynamics of solid bodies in the solar nebula". In: *MNRAS* 180, S. 57–70.
- Whitworth, A. P. & M. R. Bate (2002). "Dust dynamics in dense molecular cores". en. In: *MNRAS* 333.3, S. 679–686. ISSN: 0035-8711, 1365-2966. DOI: 10.1046/j.1365-8711.2002.05448.x.
- Willacy, K. (2007). "The Chemistry of Multiply Deuterated Molecules in Protoplanetary Disks. I. The Outer Disk". en. In: *ApJ* 660.1, S. 441. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1086/512796.
- Willacy, K. & P. M. Woods (2009). "Deuterium Chemistry in Protoplanetary Disks. II. The Inner 30 AU". en. In: *ApJ* 703.1, S. 479. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1088/0004-637X/703/1/479.
- Wurm, Gerhard & Martin Schnaiter (2002). "Coagulation as Unifying Element for Interstellar Polarization". en. In: *ApJ* 567.1, S. 370. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1086/338498.
- Yang, Le & Fred J. Ciesla (2012). "The effects of disk building on the distributions of refractory materials in the solar nebula". en. In: *M&PS* 47.1, S. 99–119. ISSN: 1945-5100. DOI: 10.1111/j.1945-5100.2011.01315.x.
- Yang, Le, Fred J. Ciesla & Conel M.O'D. Alexander (2013). "The D/H ratio of water in the solar nebula during its formation and evolution". In: *Icarus* 226.1, S. 256–267. ISSN: 0019-1035. DOI: 10.1016/j.icarus.2013.05.027.
- Zahnle, Kevin, Laura Schaefer & Bruce Fegley (2010). "Earth's Earliest Atmospheres". en. In: *Cold Spring Harbor Perspectives in Biology* 2.10, a004895. ISSN: , 1943-0264. DOI: 10.1101/cshperspect.a004895.
- Zhang, K., K. M. Pontoppidan, C. Salyk & G. A. Blake (2013). "Evidence for a Snow Line beyond the Transitional Radius in the TW Hya Protoplanetary Disk". en. In: *ApJ* 766.2, S. 82. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.1088/0004-637X/766/2/82.
- Zubko, Viktor, Eli Dwek & Richard G. Arendt (2004). "Interstellar Dust Models Consistent with Extinction, Emission, and Abundance Constraints". en. In: *ApJS* 152.2, S. 211. ISSN: 0067-0049. DOI: 10.1086/382351.
- Zucconi, A., C. M. Walmsley & D. Galli (2001). "The dust temperature distribution in prestellar cores". In: *A&A* 376, S. 650–662. ISSN: 0004-6361. DOI: 10.1051/0004-6361:20010778.

---

Für Zeitschriften wurden die Abkürzungen des von der NASA betriebenen "Astrophysics Data System" (ADS) verwendet.



# A. Numerische Details

Um die zeitliche Entwicklung der Dichte in der Scheibenphase zu bestimmen, muss eine Kontinuitätsgleichung numerisch gelöst werden. Die hierfür verwendeten Verfahren sollen nachfolgend in Kürze motiviert und beschrieben werden. Der gesamte Code, der zur Anfertigung dieser Arbeit verwendet wurde, kann über das SVN-Repository des DLR unter der Bezeichnung HGF3100 abgerufen werden.

## A.1. Herleitung der Kontinuitätsgleichung in der Finite Volumen Formulierung

Die allgemeine Transportgleichung eines Ensembles von Teilchen einer Flüssigkeit mit der Eigenschaft  $\phi$  wird beschrieben durch (siehe z.B. Standardwerke wie Oran & Boris (2005) oder LeVeque (2002)):

$$\frac{d}{dt} \int_V \phi dV = \int_V \left[ \underbrace{\partial_t \phi}_{\text{zeitliche Änderung}} + \underbrace{\nabla \cdot J_{Konv.}}_{\text{Konvektion}} - \underbrace{\nabla \cdot J_{Diff}}_{\text{Diffusion}} \right] dV = \int_V \underbrace{S_\phi}_{\text{Quellterme}} dV \quad (\text{A.1})$$

Durch Anwendung des Gausschen Satzes für die räumlichen Ableitungen lässt sich das Volumenintegral in ein Oberflächenintegral überführen:

$$\int_P \nabla \cdot \mathbf{J} dV = \oint_{\partial P} \mathbf{J} \cdot d\mathbf{S} = \oint_{\partial P} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dS = J_n - J_s + J_o - J_w \quad (\text{A.2})$$

Dabei wurde die lokale Formulierung dieser Gleichung für eine hinreichend kleine Zelle  $P$  mit den Dimensionen  $[n, s] \times [o, w]$  des betrachteten Volumens  $V$  verwendet.  $\partial P$  bezeichnet dann die Oberfläche dieser Zelle und  $\mathbf{n}$  den Normalenvektor der entsprechenden Seite. Da  $J_n, J_s, J_o, J_w$  den Werten des Flusses  $J$  an den Grenzen der Volumenzelle  $P$  entsprechen, kann, falls diese bekannt sind, damit nun die zeitliche Änderung der Eigenschaft  $\phi$  in der Gitterzelle bestimmen. Die Werte von  $\phi$  an den Zonengrenzen ergeben sich hierbei durch geeignete "Interpolation" aus den volumenzentrierten Werten von  $\phi$  der benachbarten Zellen. Alle Zellen sind also implizit voneinander abhängig und müssen durch eine entsprechende Methode kollektiv gelöst werden. Die Verwendung der

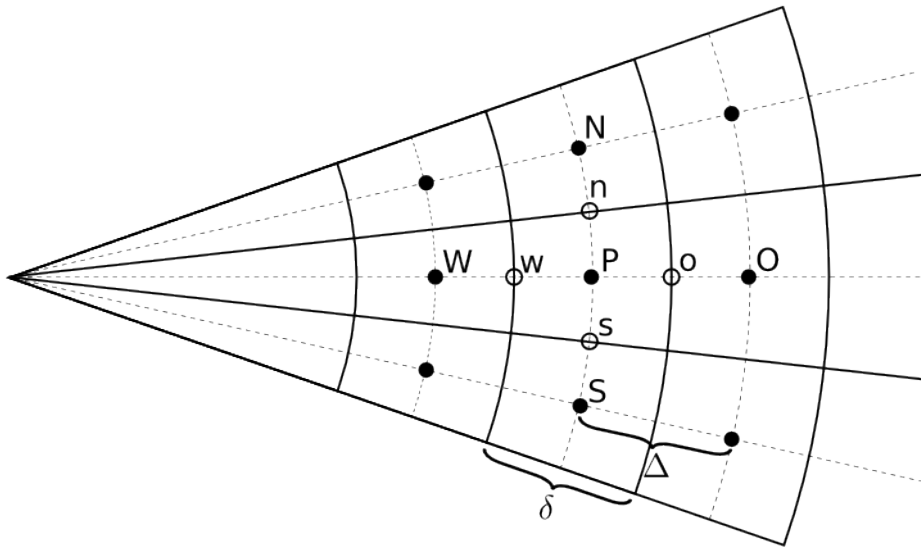
Werte an den Zellengrenzen wird auch “Staggered Mesh” genannt und stellt numerisch sicher, dass ein positiver Fluss über den Rand von Zelle  $P1$  nach Zelle  $P2$  um den exakt selben Betrag für  $P2$  positiv gewertet wird wie für die Quellzelle  $P1$  negativ. Es können also keine numerischen Verluste auftreten, weshalb man diese Formulierung auch “flusserhaltend” nennt. Der globale Verlauf des gesuchten Profils  $\phi(\mathbf{x})$  ergibt sich aus der Bedingung, dass sein Verlauf im Mittel die lokalen Differentialgleichungen erfüllt (Gebietskollokation) (Oran & Boris, 2005). Wird  $\phi$  mit der Dichte  $\rho$  identifiziert und Massenerhaltung angenommen

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV = \frac{d}{dt} M = \dot{M} = 0 \quad (\text{A.3})$$

ergibt sich aus Gleichung A.1 die Kontinuitätsgleichung.

## A.2. Diskretisierung der Kontinuitätsgleichung

Im Folgenden soll auf die Ableitung der speziellen Differenzenformel der Kontinuitätsgleichung 2.48 für den Staub eingegangen werden. Die Advektion des Gases wird analog zu der des Staubes diskretisiert. Hierfür wird ein sphärisches Gitter für die Berechnung auf dem Gebiet verwendet. Dadurch ist eine bessere Abdeckung über das Simulationsgebiet als bei Verwendung kartesischer Koordinaten gewährleistet, und die Strömungsrichtung ist weitgehend senkrecht zu den Zellgrenzen der Gittergeometrie, was numerisch von Vorteil ist (Wehrstedt, 2004). Durch die lokale Orthogonalität des Gitters kann ein sogenanntes “Dimensional Splitting” angewendet werden. Dabei werden die Koordinaten  $r$  und  $\theta$  getrennt diskretisiert und anschließend zur vollen Lösung aufaddiert. Die Bezeichnung der Notation ist in Abbildung A.1 dargestellt. Anders als in diesem einfachen Beispiel ist jedoch das für die Berechnung der Scheibenphase verwendete Gitter in radialer Richtung nicht äquidistant. Auf diese Weise kann den sich radial ändernden Größen Rechnung getragen werden, wobei die Oberflächen der Zellen in radialer und meridionaler Richtung eine ähnliche Ausdehnung besitzen. Dies bewirkt jedoch wiederum, dass die geometrischen Mittelpunkte der Zellen nicht mehr mit den volumen-zentrierten Mittelpunkten übereinstimmen. Da dies auch numerische Auswirkungen hat (Mönchmeyer & Müller, 1989), muss dies kompensiert werden, indem für  $r \rightarrow 0$  auf die volumen-zentrierten Mittelpunkte als Zellmittelpunkte übergegangen wird. Das Gitter wurde mit einer Auflösung von  $300 \times 100$  Zellen, in radialer ( $r$ ) bzw. polarer Richtung ( $\theta$  zwischen Rotationsachse und Äquator) parametrisiert. In Testrechnungen wurde eine um den Faktor zwei höhere Auflösung gewählt, ohne dass nennenswerte Unterschiede in den Ergebnissen aufgetreten wären.



**Abb. A.1.:** Nomenklatur im sphärischen Gitter. Die vollen Punkte bezeichnen die geometrischen Mittelpunkte der Zellen. In Formeln werden diese durch große Buchstaben gekennzeichnet. Die unausgefüllten Punkte befinden sich auf den Mittelpunkten der Zellengrenzflächen und werden mit kleinen Buchstaben markiert.  $\Delta$  bezeichnet den positiven Abstand der Mittelpunkte zweier Gitterzellen,  $\delta$  bezeichnet die positive Breite der Zelle.

Das sich ergebende Differentialgleichungssystem wird über die Linienmethode (MOL) gelöst. Dafür wird zunächst die Raumkoordinate mit einem geeigneten Verfahren diskretisiert und anschließend angenommen, dass sich das System in der einzig verbleibenden Variablen  $t$  kontinuierlich ändert. Dies entspricht der Approximation:

$$\underbrace{\frac{dw_i(t)}{dt} \approx \frac{\partial c(x, t)}{\partial t}}_{\text{MOL}} = \underbrace{\frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2} \approx F_i(w_i)}_{\text{Raumdiskretisierung}} \quad \text{mit} \quad w_i \approx c(x_i, t)$$

Die  $w_i$  sind dabei die Werte der Funktion  $c$  an den Orten  $x_i$ .  $F_i$  ist eine reine Funktion der Werte an den Stützstellen  $w_i$  und stellt die Näherung der räumlichen Ableitungen dar. Da die Zeit durch diese Annahme die einzige verbleibende Variable ist, können robuste, adaptive Löser für gewöhnliche Differentialgleichungen zur Berechnung dieses Gleichungssystems verwendet werden.

### A.2.1. Diskretisierung diffusiver Terme

Für den diffusiven Fluss  $J_{Diff}$  wird oft ein Ansatz gemäß dem Fick'schen Gesetz gewählt, bei dem der Fluss proportional zum Gradienten der entsprechenden Größe ist:

$$\nabla \cdot (J_{Diff}) = \nabla \cdot (D \nabla \phi) \quad (\text{A.4})$$

Die entsprechende Gleichung für die Bewegung des Staubes unter Berücksichtigung der sphärischen Geometrie lautet dann:

$$\partial_r \hat{\rho}_P = \frac{1}{r_P^2 \cdot \delta r_P} (r_o^2 J_o - r_w^2 J_w) \quad (\text{A.5})$$

$$\partial_\theta \hat{\rho}_P = \frac{1}{r_P \cdot \sin(\theta_P) \cdot \delta \theta_P} (\sin(\theta_n) J_n - \sin(\theta_s) J_s) , \quad (\text{A.6})$$

mit den Diffusionsflüssen  $f_o, f_w, f_n, f_s$  an den Zellgrenzen:

$$J_o = \frac{1}{\Delta r_o} D_o (\hat{\rho}_W - \hat{\rho}_P) \quad \text{mit} \quad D_o = \frac{\rho_o \nu_o}{Sc} \quad (\text{A.7})$$

$$J_w = \frac{1}{\Delta r_w} D_w (\hat{\rho}_P - \hat{\rho}_O) \quad \text{mit} \quad D_w = \frac{\rho_w \nu_w}{Sc} \quad (\text{A.8})$$

$$J_n = \frac{1}{r_n \cdot \Delta \theta_n} D_n (\hat{\rho}_N - \hat{\rho}_P) \quad \text{mit} \quad D_n = \frac{\rho_n \nu_n}{Sc} \quad (\text{A.9})$$

$$J_s = \frac{1}{r_s \cdot \Delta \theta_s} D_s (\hat{\rho}_P - \hat{\rho}_S) \quad \text{mit} \quad D_s = \frac{\rho_s \nu_s}{Sc} \quad (\text{A.10})$$

Sc bezeichnet wie in Abschnitt 2.4.1 beschrieben die Schmidt-Zahl.

### A.2.2. Diskretisierung des konvektiven Terms

Die advektiven Flüsse  $F$  ergeben sich dabei aus dem Produkt von Geschwindigkeitsvektor und Dichten an den Zellengrenzen. Unter Beachtung der sphärischen Geometrie ergeben sich folgende Gleichungen:

$$\partial_r (\hat{\rho}_P \mathbf{v}_P) = \frac{1}{r_P^2 \cdot \delta r_P} (F_w - F_o) \quad (\text{A.11})$$

$$\partial_\theta (\hat{\rho}_P \mathbf{v}_P) = \frac{1}{r_P \cdot \sin(\theta_P) \cdot \delta \theta_P} (F_n - F_s) \quad (\text{A.12})$$

Bei Konvektion ist die Beachtung der Strömungsrichtung von entscheidender Bedeutung. Da Informationen bzw. Störungen sich stromab schneller ausbreiten als stromauf, muss hier ein entsprechend gewichtetes Interpolationsschema gewählt werden um die Flüsse über die Zellgrenzen zu approximieren. Daher werden meist sogenannte "Upwind"-Verfahren eingesetzt, die in ihrem Kernel mehr stromauf gelegene Zellen verwenden, um die Interpolation zu verbessern. Die Anzahl an Stützstellen stellt dabei die maximal



realisierbare Ordnung des Verfahrens dar. Wegen der Abhängigkeit der Differenzenformel von der Strömungsrichtung müssen für jede Zelle zwei Varianten des Stencil vorgehalten werden. In dem hier verwendeten Ansatz stellen sie sicher, dass zwei stromauf und eine stromabwärts gelegene Zelle für die Interpolation des Flusses verwendet werden:

$$\begin{aligned}
 F_o &= v_r [\hat{\rho}_P + \Psi(\Theta_o)(\hat{\rho}_O - \hat{\rho}_P)] & \text{für} & & v_r > 0 \\
 F_o &= v_r [\hat{\rho}_O - \Psi(\Theta_o^{-1})(\hat{\rho}_O - \hat{\rho}_P)] & \text{für} & & v_r < 0 \\
 F_w &= v_r [\hat{\rho}_W + \Psi(\Theta_w^{-1})(\hat{\rho}_P - \hat{\rho}_W)] & \text{für} & & v_r > 0 \\
 F_w &= v_r [\hat{\rho}_P - \Psi(\Theta_w)(\hat{\rho}_P - \hat{\rho}_W)] & \text{für} & & v_r < 0 \\
 \\ 
 F_n &= v_\theta [\hat{\rho}_P + \Psi(\Theta_n)(\hat{\rho}_N - \hat{\rho}_P)] & \text{für} & & v_\theta > 0 \\
 F_n &= v_\theta [\hat{\rho}_S - \Psi(\Theta_n^{-1})(\hat{\rho}_N - \hat{\rho}_P)] & \text{für} & & v_\theta < 0 \\
 F_s &= v_\theta [\hat{\rho}_S + \Psi(\Theta_s^{-1})(\hat{\rho}_P - \hat{\rho}_S)] & \text{für} & & v_\theta > 0 \\
 F_s &= v_\theta [\hat{\rho}_P - \Psi(\Theta_s)(\hat{\rho}_P - \hat{\rho}_S)] & \text{für} & & v_\theta < 0
 \end{aligned}$$

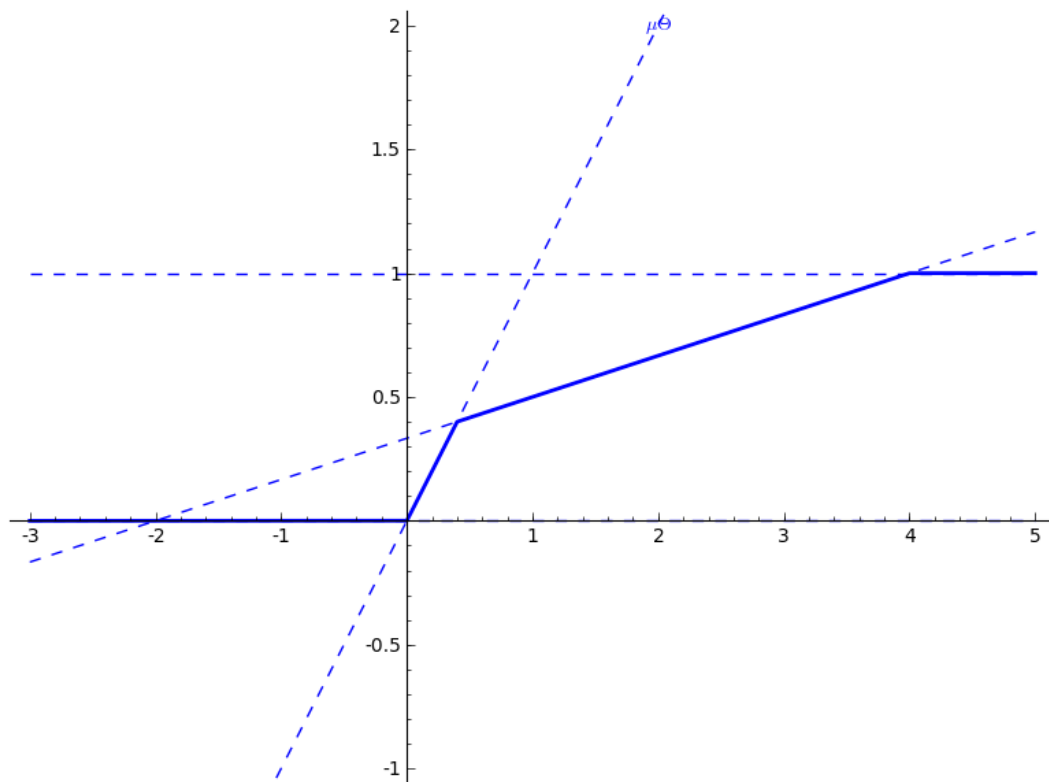
mit:

$$\begin{aligned}
 \Theta_o &= \frac{\hat{\rho}_P - \hat{\rho}_W}{\hat{\rho}_O - \hat{\rho}_P} & \Theta_w &= \frac{\hat{\rho}_O - \hat{\rho}_P}{\hat{\rho}_P - \hat{\rho}_W} & \Theta_n &= \frac{\hat{\rho}_P - \hat{\rho}_S}{\hat{\rho}_N - \hat{\rho}_P} & \Theta_s &= \frac{\hat{\rho}_N - \hat{\rho}_P}{\hat{\rho}_P - \hat{\rho}_S} \\
 \Theta_o^{-1} &= \frac{\hat{\rho}_O - \hat{\rho}_O}{\hat{\rho}_O - \hat{\rho}_P} & \Theta_w^{-1} &= \frac{\hat{\rho}_W - \hat{\rho}_W}{\hat{\rho}_W - \hat{\rho}_P} & \Theta_n^{-1} &= \frac{\hat{\rho}_N - \hat{\rho}_N}{\hat{\rho}_N - \hat{\rho}_P} & \Theta_s^{-1} &= \frac{\hat{\rho}_S - \hat{\rho}_S}{\hat{\rho}_S - \hat{\rho}_P}
 \end{aligned}$$

Desweiteren muss sichergestellt werden, dass innerhalb eines Zeitschrittes nicht mehr aus einer Zelle in die nächste fließen kann, als an Material in dieser vorhanden ist. Um dies sicherzustellen werden oft Flusslimiter-Funktionen  $\Psi$  eingesetzt. Als Parameter wird dieser Funktion jeweils das Verhältnis zweier Gradienten aus der Strömungsrichtung übergeben. Ein weiterer Vorteil bei der Verwendung eines Flusslimiters ist das Sicherstellen stets positiver Massendichten. Die hier verwendete Limiterfunktion ist bei glatten Lösungen in dritter Ordnung genau (Koren, B., 1993):

$$\Psi(\theta) = \text{Max} \left( 0, \text{Min} \left( 1, \frac{1}{3} + \frac{1}{6}\theta, \mu\theta \right) \right) \quad (\text{A.13})$$

In dieser Arbeit wird  $\mu = 1$  verwendet. Der Verlauf der Limiterfunktion kann in Abbildung A.2 betrachtet werden.



**Abb. A.2.:** Flusslimiterfunktion entsprechend Gleichung A.13. Der maximale Fluss wird entsprechend skaliert.

# Erklärung

Ich erkläre hiermit an Eides statt, dass ich

1. die vorliegende Dissertation mit dem Thema:

DIE BESCHREIBUNG DER ENTWICKLUNG VON DEUTERIERTEM WASSER MIT-  
HILFE EINES MULTI-ZUSTANDSMODELLS DES SOLAREN NEBELS

selbstständig verfasst,

mit Genehmigung des Dekans der Fakultät für Elektrotechnik,

Informationstechnik, Physik der Technischen Universität Braunschweig,

vertreten durch den Mentor der Arbeit, Prof. Dr. Uwe Motschmann,

die Ergebnisse bereits teilweise in den genannten Publikationen veröffentlicht,

nicht als Diplomarbeit oder ähnliche Prüfungsarbeit verwendet,

und die benutzten Hilfsmittel vollständig angegeben habe.

2. früher ein Promotionsgesuch noch nicht eingereicht habe.

Berlin, Dezember 2015

.....

Philipp Gast



# Danksagung

Diese Arbeit konnte nur durch die Unterstützung verschiedener Personen entstehen, bei denen ich mich hiermit bedanken möchte.

- Ich danke meinen Betreuern Prof. Dr. Uwe Motschmann, Dr. Carmen Tornow und Dr. Ekkehard Kührt beim DLR für die Gelegenheit, an diesem spannenden und herausfordernden Thema forschen zu können.
- Desweiteren danke ich der Helmholtz Allianz für die Ermöglichung dieser Promotion durch die finanzielle Förderung, die ich über das Projekt “Planetary Evolution and Life” während meiner Dissertation erhalten habe, und die es mir erlaubte mit vielen Kollegen aus anderen Fachgebieten an diesem interdisziplinären Themenbereich zu arbeiten.
- Ich danke den Gutachtern für die Bewertung dieser Arbeit.
- Bei meinen Kollegen und allen anderen Mitarbeitern vom DLR möchte ich mich für die nette Arbeitsatmosphäre bedanken. Insbesondere Stefan Kupper hat trotz knapper Zeit ein Ohr für mich gehabt.
- Herzlich bedanken möchte ich mich bei Martin Marmulla für die Hilfe mit der Deutschen Sprache und einen nüchternen Blick von außen.
- Meiner Familie, die mir mein Studium überhaupt ermöglicht hat, bin ich dafür sehr dankbar.
- Am meisten Dank gebührt jedoch meiner Frau Nicole für all die Geduld und hingebungsvolle Unterstützung vor allem während der letzten Phase vor der Abgabe.
- Desweiteren danke ich all jenen Menschen, die mich bei der Anfertigung dieser Arbeit unterstützt haben in dem Maße, wie sie es selbst für angemessen halten.